経路積分と量子解析

いかにして量子現象を数理的に扱うか

第1回

量子古典対応を基に量子系を視る

鈴木 増雄

1.1 本連載を始めるにあたって

最近の物理学の研究においては，分野横断的な交流によって大きく発展することが多い．物理現象の中でも特に，量子現象は，素粒子や原子分子の領域においては言うに及ばず，広く物質科学から宇宙物理（ブラックホールのエントロピーなど）まで，様々な分野で重要な役割を果たしている．これらの幅広い分野の理論的研究において基本的な概念の一つは，量子古典対応（変換）である[1~5]．その具体的な数学的処法を与えるのが，本連載で取り扱う経路積分[6,7]と量子解析[5,8,9]である．

量子古典対応にも2つの立場がある．一つは，古典系を量子化するディラック-ファインマンの立場である．すなわち，古典的なラグランジアンを用いて経路積分を導入することにより，量子力学的定式化を行うものである．後に詳しく解説するように，ファインマンは古典的な調和振動子のラグランジアンを経路積分表示することにより，ハイゼンベルグの行列力学やシュレーディンガーの波動力学による量子力学と同等な「経路積分による量子力学の定式化」を発見した．

もう一つは，もともと量子的な物理対象系（例えば，スピン系など）を古典変数によって表現される系（いわゆる古典系）に変換するものである[1~5]．どちらの立場も量子系を経路積分[6,7]や経路和[1,3~7]で表すという点では類似しているが，目的が逆になっている点が大きな違いである．この量子古典対応（ST変換とも呼ばれている変換）を用いると，量子系の計算機実験が可能となる．この典型的な方法が量子モンテカルロ法である[1,10]．この方法は，現在多くの物性物理学の分野で用いられている．

本連載は，この量子古典対応という概念を主軸にして経路積分と量子解析（非

可換な演算子の関数の微分やテーラー展開を扱う数学的方法）を，次のようなテーマに分けて解説する予定である．

- **古典力学から量子力学へ**（ファインマンの経路積分法の導入／すべては調和振動子に始まる／量子ゆらぎを表す経路積分／半古典近似と変分法／場の理論の経路積分量子化と藤川の方法（量子アノマリー）／変分原理と経路積分／散逸ダイナミクスの変分原理と経路積分量子化）
- **量子古典対応**（非可換系を可換系で表現する—量子古典変換（ST変換）／トロッター公式とその一般化／量子モンテカルロ法の数理／カオスと高精度計算アルゴリズム／高次指数分解の一般論／物性物理への応用／宇宙物理学とAdS/CFT対応／ブラックホールのエントロピー）
- **量子解析—非可換微分法**（テーラー展開の量子版を創る／非可換微分法としての量子解析—量子古典対応の数理／指数演算子の展開公式／BCH（Baker–Campbell–Hausdorff）公式／非可換成分の行列（大行列）と準行列式）
- **統計物理学と量子解析**（量子解析の非平衡量子統計力学への応用／輸送現象における不可逆性とエントロピー生成—密度行列の対称性と量子解析／量子古典対応と不可逆性—線形応答から非線形応答まで／散逸系における不確定性原理／熱場ダイナミクス（Thermal Field Dynamics; TFD）と不可逆性—緩和と熱浴／熱力学的エントロピーと情報エントロピー／ゆらぎの定理について）
- **物性物理・量子情報の基礎的問題への応用**（巨視的量子トンネル効果／量子エンタングルメントと熱場ダイナミクス）
- **確率過程と経路積分・量子解析**（フォッカー・プランク方程式の解の表示法／秩序形成理論—代数的解法とスケーリング解／宇宙のインフレーションメカニズムとスケーリング理論）
- **確率的量子化の方法—量子古典対応から古典量子対応へ**

1.2 各テーマの概要

1.2.1 「古典力学から量子力学へ」の概略

ニュートンによって確立された古典力学の運動方程式を出発点にして，その系の量子力学的定式化をするファインマンの経路積分の話から始めたい．量子力学の本質は，決定論的古典力学に対して，量子的不確定性（ゆらぎ）の存在にある．この量子的ゆらぎを経路積分によって表現することにより，系を量子化することができる．このアイデアはもとはディラックによる．ファインマンは，このディラックのアイデアに基づいて，量子系の遷移振幅 $Z_{\mathrm{ini,fin}}$ を

$$Z_{\mathrm{ini,fin}} \equiv {}_{\mathrm{fin}}\langle \psi \mid \psi \rangle_{\mathrm{ini}} = \int_{\mathrm{ini}}^{\mathrm{fin}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int \mathscr{L}(x(t),\dot{x}(t))dt\right) D[x(t)] \quad (1.1)$$

のように表した．ただし，$\int \cdots D[x(t)]$ は経路 $\{x = x(t)\}$ に関する「経路積分」を表し，$\mathscr{L}$ は古典系のラグランジアン

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2 - U(x) \tag{1.2}$$

を表す[6,7]．ここで，$U(x)$ は系に働く保存力に対応するポテンシャルエネルギーである．式 (1.1) の遷移振幅（いわば作用）が極値を持つような経路が古典力学の経路となる．そのまわりのゆらぎとして量子効果が記述されることになる．

式 (1.1) を，具体的なポテンシャル $U(x)$ に対して計算するには，半古典近似を使うことが多い[6,7]．

また，式 (1.1) の中の指数関数の肩の時間積分を作用 I とみれば，それを極小とする最小作用の原理となり，この変分原理から，古典的なハミルトン方程式が導かれることはよく知られている通りである[6,7]．

ところで，散逸のある力学系，例えば，

$$m\ddot{x}(t) + \zeta\dot{x}(t) - F_{\rm dyn}(x(t)) = 0 \tag{1.3}$$

を変分原理で導くような変分関数，すなわち散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\rm diss}$ は今まで見つかっていなかった．その理由は，力学的力 $F_{\rm dyn}(x(t))$ に対して，散逸力 $-\zeta\dot{x}(t)$ は時間反転に対して，反対称的であり他の項と対称性が異なるからである．無理やり時間依存の因子をつけたりして変分関数を数学的に今までの $x(t), \dot{x}(t), t$ の関数の範囲で求めても物理的な変分原理にはならない[11]．

ところが，最近この難問を筆者は解決することができた[12]．そのアイデアは，輸送現象（定常状態）の変分原理を久保の線形応答[13]から非線形応答[14]に拡張する際に導入された「瞬間のエントロピー生成・散逸ではなく，プロセス全体（過去から問題とする時刻まで）を考慮すること」という新しい視点より生まれた．すなわち，運動方程式 (1.3) を導く散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\rm diss}$ は物理的におおむね

$$\mathscr{L}_{\rm diss} = \frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2 - U(x) - \int_{\substack{x(0)\\ \text{(path)}}}^{x(t)} \zeta\dot{x}(t'(x'))dx' \tag{1.4}$$

で与えられることがわかった[12]．ここで，$U(x)$ は $\partial U(x)/\partial x = -F_{\rm dyn}(x)$ を充たす力学的ポテンシャルである．新しい点は式 (1.4) の右辺の最後の項が過去の経路に依る積分になっていることである．ただし，$t(x)$ は $x = x(t)$ の逆関数であり，多価関数になるので経路を指定しないと一意的に決まらず，上の積分はこの意味で経路に依存することになる．この点が全く新しい．このように，散逸変分関数は $\mathscr{L}_{\rm diss}$ の時間積分であるから，2 重積分（カルタンの相対積分不変式または K–T チェンの逐次積分形）になっていることが散逸系の変分原理の特徴である[14]．

さらに，ここで導入した散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\rm diss}$ を式 (1.1) の $\mathscr{L}$ の代わりに用いると，散逸系の経路積分量子化が可能となる．この定式化を用いて，散逸効果を含む不確定関係 $\Delta x \Delta p \geq \delta(\hbar, \zeta)$ が導ける．右辺の関数 $\delta(\hbar, \zeta)$ の具体的な形など，詳しくは次回以降の解説を参照して頂きたい．

1.2.2 「量子古典対応」の概略

前節でも述べた通り，この概念は古くディラックやファインマンにまで遡る

ことができる．彼らは古典系から出発して，それに対応する量子系を記述する形式として経路積分表示に到達した．一方，統計物理学の分野では，元来量子力学的な系を古典表示して取り扱い易くする方法が提唱された[1~5]．量子系が古典系に等価になるといっても，それは，決して通常の有限の値を持つ短距離力で記述される古典系ではない．それは，後で説明する「量子軸」方向のサイズと共に発散するような特異な力を持つ．また，その相互作用の対称性も通常のものとは異なり，元の量子相互作用に由来する新しい型の対称性になる．これらの特徴は，量子古典対応に共通な本質である．実際，後の回で述べる AdS/CFT 対応では，重力という（示量性でない）長距離力を持つ反ド・ジッター（Anti-de Sitter; AdS）宇宙と共形場理論（Conformal Field Theory; CFT）との対応になっている[2]．

統計力学の量子模型の典型的な例は，量子ハイゼンベルグ模型であり，次のように $O(3)$ 対称性を持つ 2 体力のハミルトニアンで与えられる：

$$\mathscr{H} = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j. \tag{1.5}$$

この量子スピン系を，古典的な変数（可換な変数，すなわちアーベリアン）であるイジングスピン（$S_i = \pm 1$）を用いて表すと，対称性の高い 4 体力イジング模型となる[1]．しかも，d 次元量子スピンは $(d+1)$ 次元イジング模型で表され，新たに追加された 1 次元方向は「量子軸」または「トロッター軸」（筆者が最初に名づけた）と呼ばれている．この方向の相互作用は，「トロッター数」（トロッター軸方向の長さ）を大きくすると共に無限大になる特異な相互作用であることを注意しておきたい．

このように，特異な相互作用を持つ古典系になっても，相互作用が可換であることは大きな利点・強みである．実際，この変換された系は計算機実験（シミュレーション）で研究することができる．その代表がモンテカルロ法による研究方法である．これは「量子モンテカルロ法」と呼ばれ，多くの分野で盛んに利用されている[1,10]．

以上の量子古典対応の背後にあるのは，互いに非可換な演算子 A, B に対する，次のいわゆるトロッター公式

$$\mathrm{e}^{x(A+B)} = \lim_{n\to\infty} (\mathrm{e}^{\frac{xA}{n}} \mathrm{e}^{\frac{xB}{n}})^n \tag{1.6}$$

である．この公式は，演算子 A, B が有限行列のようにノルムが有界な場合には問題なく利用できるが，非有界の場合には難しい数学的研究（ノルム収束ではなく，弱収束など）の対象となる[15,16]．ここでは，そういう数学的問題は避けノルム有界な演算子を対象にして物理に応用することにする．

数学者が公式 (1.6) を利用するときは，A, B の対称性から $\exp(x(A+B))$ の対称性などを導くために使うので，厳密な収束証明や演算子の範囲（ドメイン）を気にしなければならない．しかし，物理の問題に応用する際は，トロッター数 n は大きいが有限の場合であり，むしろ，公式そのものの近似の度合のほうが重要である．

そこで，以下では，オイラー的に形式的な公式に着目して，近似の度合を上げる最近の研究成果[16]の概略を，紹介することにしよう．

まず，最低近似の公式は，よく知られているように，

$$e^{x(A+B)} = \left(e^{\frac{xA}{n}} e^{\frac{xB}{n}}\right)^n + O\left(\frac{x^2}{n}\right) \tag{1.7}$$

である．次に，右辺の 2 つの積を対称化すると，1 次だけ近似の程度が上がって

$$e^{x(A+B)} = \left(e^{\frac{xA}{2n}} e^{\frac{xB}{n}} e^{\frac{xA}{2n}}\right)^n + O\left(\frac{x^3}{n^2}\right). \tag{1.8}$$

同様にして，任意次数の近似公式が漸化的に作られている[17]．上の公式を正規直交系で挟んで対角成分の和を取れば，量子系の状態和が古典系の状態和で表されることになる[1]．この状態和から系のエントロピーなどが求められる．

1.2.3 「量子解析—非可換微分法」の概略

量子力学の理論形式は非可換な演算子で表現されることに特徴がある．2 つの非可換な演算子の観測値を同時に確定することはできず，不確定性関係が現れる．

このような非可換な演算子 A, B に対して，関数 $f(A+B)$ を演算子 B で展開する必要に迫られることが多い．通常の c-数（可換な数）x, y に対しては通常のテーラー展開

$$f(x+y) = f(x) + f^{(1)}(x)y + \cdots + \frac{1}{n!}f^{(n)}(x)y^n + \cdots \tag{1.9}$$

が成り立つことはよく知られている（ここで，$f^{(n)}(x)$ は $f(x)$ の n 階微分である）．これを非可換な演算子 A, B の関数 $f(A+B)$ に拡張して筆者は式 (1.9) の量子版を作った．それらがこれからアイデアだけ説明する「量子解析」である[8,9]．演算子 A, B が互いに可換な場合にはもちろん

$$f(A+B) = f(A) + f^{(1)}(A)B + \cdots + \frac{1}{n!}f^{(n)}(A)B^n + \cdots \tag{1.10}$$

が成り立ち，$f^{(n)}(A)B^n$ は単に 2 つの演算子 $f^{(n)}(A)$ と B^n の積である．ところが，A と B が非可換な場合には，事情は全く変わってしまう．量子古典対応という観点で話を進めたいので，形式的には式 (1.9) のテーラー展開と同形にして，その中味は量子的に拡張することにする．そこで，演算子を他の演算子に変換する「超演算子」を用いて，演算子 A の関数 $f(A)$ の A に関する「微分超演算子 $df(A)/dA$」を次のように導入する：

$$\frac{df(A)}{dA} = \int_0^1 f^{(1)}(A - t\delta_A)dt = \frac{f(A) - f(A-\delta_A)}{\delta_A} = \frac{\delta_{f(A)}}{\delta_A}. \tag{1.11}$$

ただし，δ_A は $\delta_A B \equiv [A, B]$ で定義される超演算子（通常，内部微分と呼ばれる）．式 (1.11) の中の A は左から A をかけて積を作る超演算子と解釈する．こうすると，A と δ_A は互いに可換な超演算子となる：

$$(A\delta_A)B = (\delta_A A)B = A[A, B]. \tag{1.12}$$

この A と δ_A の可換性のために，式 (1.11) の t 積分も 3 つ目の分数式も意味を持つのである（ちなみに，δ_A の逆 δ_A^{-1} は存在しないが，$f(A) - f(A-\delta_A)$

は δ_A に比例するので δ_A で割ることが可能となる). 超演算子の差分の比で表された式 (1.11) を「量子微分」と呼ぶ. この量子解析の定式化では, 量子古典対応が明確である. すなわち, A と B が可換な場合には, δ_A は零超演算子とみなすことができ, 式 (1.9) は古典微分 $f^{(1)}(A)$ に帰着する.

同様にして, 高階量子微分 $d^n f(A)/dA^n$ も定義できて, これを $f^{(n)}(A)$ の代わりに用いると, 形式的には式 (1.10) と同形の量子テーラー展開が証明できる[8,9].

この量子微分を用いると, 指数演算子 $\exp(A+xB)$ や対数演算子 $\log(A+xB)$ のパラメータ x に関する展開が可能となる[8,9]. こうして, BCH 公式の一般項やその他多くの非可換公式を具体的に容易に導けることになった[8,9].

また, 行列を成分に持つ行列 (大行列) や行列式 (準行列式) も同様に扱うことができる.

1.2.4 「統計物理学と量子解析」の概略

量子解析は非平衡統計力学を扱う際には極めて有効である. フォン・ノイマン方程式から, 密度行列 $\rho(t)$ の任意の関数 $f(\rho(t))$ が再びフォン・ノイマン方程式と同形の方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(\rho(t)) = [\mathscr{H}(t), f(\rho(t))] \tag{1.13}$$

を充たすことが公式 (1.11) を用いると容易に示せる. 式 (1.13) は量子エントロピーや量子エンタングルメントを議論する際に役に立つ. また, 線形応答理論[13]におけるエントロピー生成と不可逆性を導く際にも, 非線形輸送現象の解析の場合にも, 量子解析は便利である[14].

さらに, 統計力学を場の理論形成で扱う熱場ダイナミクスを定式化する際には, $\rho(t)^{1/2}$ を扱うので, やはり量子解析で導かれる公式 (1.13) は重要である[18].

最近よく話題となる「ゆらぎの定理」や情報エントロピーの使い方の問題点にもふれる予定である.

1.2.5 「物性物理・量子情報の基礎的問題への応用」の概略

物性物理学の研究分野はあまりにも広大であり, その中の基礎的問題に絞っても, 超伝導, 超流動, 近藤効果, 乱れと局在現象, スピングラスと情報理論, …ときりがないほど多い. ここでは, (a) レゲットらの巨視的量子トンネル効果の経路積分による取扱い, (b) 量子エンタングルメントと熱場ダイナミクスなどについて議論する. ここでも経路積分の方法が重要な役割を果たす.

1.2.6 「確率過程と経路積分・量子解析」の概略

熱的ゆらぎと量子ゆらぎは形式的には類似しているところがあり, そこに着目すると数学的には確率過程も量子力学も経路積分を用いて共通の取扱いが可能となる. 実際, 確率微分方程式の解を集団 (アンサンブル) として捉えると, 確率変数 x が時刻 t でとる確率 $P(x,t)$ を扱うことになる. それを記述する偏微分方程式がフォッカー・プランク方程式である. これを適当に変換すると, 虚時間に対するハミルトニアン定式化が得られる. これも一つの古典量子対応と形式的にはみなせる. このように, 確率過程を代数的に表現し, 発展演算子

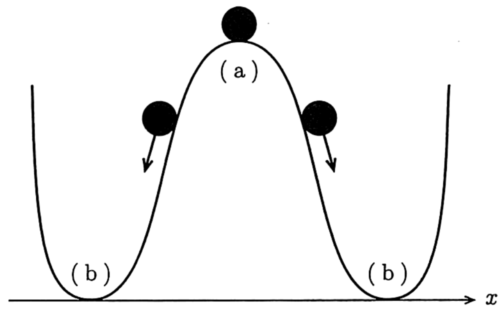


図 1.1　不安定点 (a) から安定点 (b) への緩和，または秩序生成（文献 5) より）.

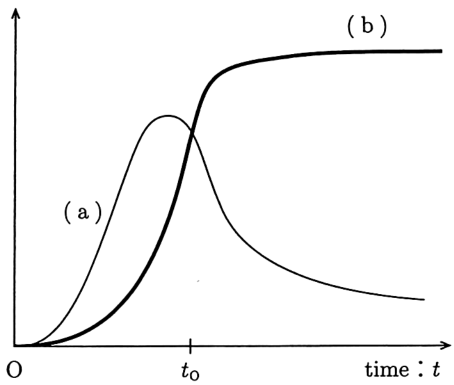


図 1.2　ミクロなゆらぎがオンセットタイム t_O 近傍で指数関数的に増大し，巨視的秩序が形成される[18]．(a) ゆらぎ，(b) 秩序パラメータ．

を指数演算子で表すと，量子解析の処法が使えるので見通しがよくなる．

例えば，図 1.1 に示される不安定点からの非線形緩和，すなわち秩序生成の理論[19]はその後のいろいろな分野での類似の理論のプロトタイプとみることができる．図に示されたポテンシャル $U(x)$ に対応する力 $-\partial U(x)/\partial x$ の他にランダムな力（ノイズ）$\eta(t)$ が働いている系の運動方程式（非線形ランジュバン方程式）は

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{\partial}{\partial x}U(x) + \eta(t) \tag{1.14}$$

と与えられる．この一見簡単に見える確率微分方程式でも，今のところ厳密解は求まっていない．しかし，物理的に本質的な領域，すなわち，秩序生成領域（オンセットタイムの近傍）の振舞いを充分良く記述する解は発見されている．それは「秩序生成のスケーリング解」と呼ばれている[18]．その定性的な振舞いは図 1.2 に示されている通りである．すなわち，オンセットタイム t_O の近傍でミクロなゆらぎが指数関数的に大きく増大し，巨視的秩序が形成される[19]．この解法といろいろな物理現象への応用については後の回の記事で詳しく説明する．

1.2.7 「確率過程量子化の方法—量子古典対応から古典量子対応へ」の概略

古典系から出発して量子化するもう一つの方法がパリジとウーによって提唱された「確率過程量子化の方法」である[20,21]．確率微分方程式の中のノイズの

大きさを，プランク定数を用いて量子効果をちょうど与えるように設定する．この方法は量子系（場の理論）を計算機実験するのに便利である．この方法は，彼ら著者たちも論文で指摘しているように，これは，ST 変換で量子スピン系を古典系に変換して計算機実験する量子モンテカルロ法と共通するアイデアに基づいている．

いずれにしても，多くの分野で量子古典変換の概念が広く普及しつつあることは喜ばしい限りである．

1.3 おわりに

以上，各テーマの概略を説明したが，次回以降，それぞれ詳しくわかり易く最新の研究成果も取り込みながら解説したい．また，できる限り応用にもふれたい．

参考文献

1) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 1454 (1976).
2) J.M. Maldacena, *Adv. Theor. Math. Phys.* **2**, 231 (1998).
3) 松枝宏明，物性研究，2011 年 7 月号，383–482 頁．
4) B.K. Chakrabarti, A. Dutta and P. Sen, *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models* (Springer, 1996).
5) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，2000）．
6) R.P. ファインマン/A.R. ヒッブス著，北原和夫訳，『ファインマン経路積分と量子力学』（マグロウヒル出版，1990）．
7) 大貫義郎，柏太郎，鈴木増雄，『経路積分の方法』（岩波書店，2000）．
8) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **183**, 339 (1997).
9) T.L. Chow 著，鈴木増雄，香取眞理，羽田野直道，野々村禎彦共訳，『科学技術者のための数学ハンドブック』（朝倉書店，2002）訳注．
10) M. Suzuki (ed.), *Quantum Monte Carlo Methods in Condensed Matter Physics.* (World Scientific, Singapore, 1993), およびその中の引用文献．
11) 大貫義郎，『力学』（岩波書店，1994）第 1 章 43 頁の解説参照．
12) M. Suzuki, *Physica* **A392**, 4279 (2013), APPC/2 プロシーデングス，and to be submitted to *Physica A*.
13) R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957).
14) M. Suzuki, *Physica* **A390**, 1904 (2011); ibid. **A391**, 1074 (2012); ibid. **A392**, 314 (2013).
15) T. Kato, *Perturbation theory for linear operators*, Springer, 第 2 版 (1976).
16) K. Aomoto, On a unitary version of Suzuki's exponential product formula, *J. Math. Soc. Japan* vol.**48**, No.3, 693 (1996).
17) M. Suzuki, *Phys. Lett.* **A146**, 319 (1990); id. *J. Math. Phys.* **32**, 400 (1991).
18) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Japan* **54**, 4483 (1985); id. *Prog. Theor. Phys.* **100**, 475 (1998); Y. Hashizume and M. Suzuki, *Physica* **A362**, 3518 (2013).
19) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 77 & 477 (1976); id. **57**, 380 (1977); id. *Suppl.* **64**, 402 (1978); id. *Adv. Chem. Phys.* **46**, 195 (1981); id. *Int. J. Mod. Phys.* **B26**, 1250001 (2012).
20) G. Parisi and Y.S. Wu, *Scientific Sinica* **24**, 483 (1981).
21) M. Namiki, *Stochastic Quantization* (Springer, 1992).

（すずき・ますお，東京大学名誉教授）

経路積分と量子解析

第2回

いかにして量子現象を数理的に扱うか

古典力学から量子力学へ(1)

変分原理，ラグランジアンおよび経路積分量子化

鈴 木　増 雄

2.1 はじめに

量子力学と古典力学との関係を議論する際には，2 つの立場が考えられる．一つは，ミクロでも成り立つ量子力学から出発して，不確定性が効かない（すなわち，プランク定数 $\hbar \to 0$ の）極限として，古典力学を捉える立場である．これは大変論理的で正統派の立場である．もう一つは，マクロな系で成り立つ古典力学という極めて直観的でわかり易い定式化から出発して，量子効果の入った定式化へと進化・発展させる立場である．経路積分による量子力学の定式化は，後者の立場である．その元祖はディラックである[1)]．彼は，古典力学のラグランジアン $\mathscr{L}(x(t), \dot{x}(t), t)(\equiv \mathscr{L}(t))$ を時間積分した作用 S を指数の肩に乗せた量

$$\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_\mathrm{a}}^{t_\mathrm{b}} \mathscr{L}(t)dt\right\} = \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(t_\mathrm{b}, t_\mathrm{a})\right\} = B(t_\mathrm{b}, t_\mathrm{a}) \tag{2.1}$$

が，2 つの時刻 t_a，t_b の状態の間の遷移確率に "対応する" ことを見抜いた[1, 2)]．ファインマンは，さらに，この "対応関係" を厳密な定式化へと発展させ，経路積分量子化の方法を発見した[2, 3)]．

2.2 ファインマンの経路積分のアイデア：大局的な捉え方[4, 5)]

ファインマンの経路積分は，式 (2.1) を始点 $x(t_\mathrm{a})$ と終点 $x(t_\mathrm{b})$ を固定したあらゆる経路について和をとったものであり，記号として

$$Z_{\mathrm{ini,fin}} = \int_{\mathrm{ini}}^{\mathrm{fin}} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_\mathrm{a}}^{t_\mathrm{b}} \mathscr{L}(x(t), \dot{x}(t), t)\right\} D[x(t)] \tag{2.2}$$

と書かれる[6~9)]．ただし，$\mathscr{L}$ はハミルトニアン $\mathscr{H}$ から，$\mathscr{L} = p\dot{x} - \mathscr{H}$ というルジャンドル変換で与えられる．

この定式化は通常のシュレーディンガーの波動方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \mathscr{H}\psi(x,t); \quad \mathscr{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{2.3}$$

による量子力学の定式化と比べて大きな特徴を持っている．それは，式 (2.3) が"微分" という局所的概念を用いて表現されているのに対して，式 (2.2) は "積分" という大局的概念を用いて表現されていることである．この違いは，単に形式的なもの（微分と積分は互いに逆演算であること）ではなく，自然法則の捉え方の違いを与える極めて根の深いものであると思われる．実際，ニュートンの古典力学は

$$m\ddot{x}(t) = \text{力}\left(= F(x(t)) \equiv -\frac{dV(x)}{dx}\right) \tag{2.4}$$

という微分方程式で表され，それを数学的に発展させて整理した解析力学のハミルトン・ヤコビ方程式

$$\mathscr{H}\left(x, \frac{\partial S}{\partial t}, t\right) + \frac{\partial S(x,t)}{\partial t} = 0 \tag{2.5}$$

で記述することもできる．ここで，

$$\psi(x,t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(x,t)\right) \tag{2.6}$$

とおくと，容易に式 (2.5) は，

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2 + V(x)\psi \tag{2.7}$$

と変形できる[9]．シュレーディンガー方程式 (2.3) と古典的表式 (2.7) は良く似ている．ただし，古典力学の非線形の部分 $(\partial\psi/\partial x)^2/\psi$ を，2 階の線形微分演算式 $\partial^2\psi/\partial x^2$ に置き換えて量子力学の基礎方程式としたところがシュレーディンガーの卓見である．この例では，参考にした方程式よりも，より簡単で美しい方程式が真の物理法則を表しており，まことに見事である．このように，局所的な捉え方では，法則を表す方程式が直接的に発見されることがあり，最初に法則を発見するのに，この局所的な捉え方は大変有効である．

それに対して，変分原理やそれと関連する経路積分は物理法則を大局的に捉える見方であり，法則自体を初めて見つけるというよりは，むしろ物理法則をより深く統一的に理解するのに適した物理の理論である．言い換えると，物理法則を大局的に捉える方向性が物理的直観で見えてきて，調和振動子のような簡単な系でそのアイデアが正しいことがわかっても，それを一般化したり，数学的に厳密に定式化するのは容易でないということである．

実際に，ファインマンのような天才的な理論物理学者でも，大学院生のときに思いついた経路積分量子化の方法を発展させるのに時間を要したようである[2,3]．思うに，ファインマンはハイスクールの物理教師の一言で，物理法則の大局的見方に目覚めたのかもしれない[4]．ニュートンの法則を用いて粒子の運動を説明する教師の講義に退屈していたファインマンを見た先生は，「ファインマン君，この問題を変分原理を用いて扱ってみなさい.」と物理の深い捉え方のあることを教えた．それ以来，ファインマンは，物理が前より一層面白い学科目になったと述懐している．若いときに良き師に出会うことがいかに大切かを如

実に表している例かとつくづく思う．読者の中にも思い当たる人が多いのではないだろうか．筆者も，恩師の久保亮五先生，M.E. Fisher 先生，I. Prigogine 先生たちとの出会いの影響を受けて物理探究の強い意欲を今なお持ち続けている．例えば，散逸系のダイナミクスを変分原理で表す散逸ラグランジアンを見つけ，それを用いて散逸系の経路積分量子化を定式化することに現在没頭している．散逸系の特徴は熱の発生とエントロピー増大であるから，散逸ラグランジアンは熱の発生の項が含まれているはずであると数年前から見当はついていた．しかし，それをどのように定式化するか，どのように変分を実行してオイラー・ラグランジュ方程式に相当する粘性抵抗を持った（散逸のある）運動方程式を導くか，その数学的処法が見つからず，四苦八苦していた．最近やっとこの長年の難問を解決することができた[10~12]．これについては，次回に詳しく解説する予定である．

2.3 経路積分と変分原理

解析力学[13]でよく知られているように，古典力学にしたがう運動の軌道は，式 (2.1) で定義される作用 $S(t_{\rm b}, t_{\rm a})$ を極小にする変分原理[5,7,14]で与えられる．極値を決める条件としてのオイラー・ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x} = 0 \tag{2.8}$$

が系の運動方程式 “$m\ddot{x}(t) =$ 力” を与える（逆に，そうなるようにラグランジアンを定義する）．したがって，古典力学の運動方程式の解 $x = x_{\rm cl}(t)$ に対する作用は極小または停留値となり，式 (2.1) の指数関数の振動が少なく全体として一番大きな値を持つ．図 2.1 に示すように，古典解のまわりの（オフシェルの）軌道もそれなりに作用 S に寄与する．それらが量子的なゆらぎの効果を与える．

実際に，式 (2.2) は

$$Z_{\rm ini,fin} = \cos\left(\frac{1}{\hbar}S(t_{\rm b}, t_{\rm a})\right) + {\rm i}\sin\left(\frac{1}{\hbar}S(t_{\rm b}, t_{\rm a})\right) \tag{2.9}$$

と変形できるので，作用 $S(t_{\rm b}, t_{\rm a})$ がプランク定数 $\hbar$ より大きくなると，それら

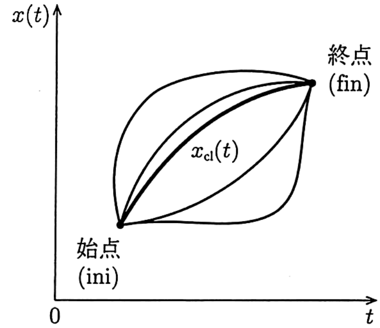


図 2.1　古典解 $x_{\rm cl}(t)$ とそのまわりのさまざまな経路．

の実部も虚部も激しく正負に振動するようになり，和をとると互いに打ち消し合って $Z_{\mathrm{ini,fin}}$ に効かなくなる．すなわち，作用 $S(t_\mathrm{b},t_\mathrm{a})$ に対する変分原理を満たす古典解が一番大きな寄与をする．

このように，変分原理は経路積分量子化の概念的な出発点となっている．

2.4 簡単な系で経路積分量子化の特徴を捉える

物理の本質は簡単な典型例で理解できることが多い．経路積分の方法も 1 次元調和振動子の場合について説明するとわかり易い[3,5,9]．この系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ は

$$\mathscr{H}=\frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2+\frac{1}{2}kx(t)^2\equiv\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}kx(t)^2 \tag{2.10}$$

の形に書けるから，それをルジャンドル変換して得られるラグランジアン $\mathscr{L}(t)$ は

$$\mathscr{L}(t)=p\dot{x}-\mathscr{H}=\frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2-\frac{1}{2}kx(t)^2 \tag{2.11}$$

となる．ここで，m は振動子の質量，k はバネ定数である．したがって，この古典系としての固有振動数 ω は $\omega=(k/m)^{1/2}$ で与えられる．

始点 $(x_\mathrm{a},t_\mathrm{a})$ と終点 $(x_\mathrm{b},t_\mathrm{b})$ を固定して解いた運動方程式 $m\ddot{x}(t)+kx(t)=0$ の古典解は

$$x_\mathrm{cl}(t)=\frac{x_\mathrm{b}\sin(\omega(t-t_\mathrm{a}))-x_\mathrm{a}\sin(\omega(t-t_\mathrm{b}))}{\sin(\omega(t_\mathrm{b}-t_\mathrm{a}))} \tag{2.12}$$

で与えられる．この古典解に対応する作用 $S_\mathrm{cl}(t_\mathrm{b},t_\mathrm{a})$ は

$$S_\mathrm{cl}(t_\mathrm{b},t_\mathrm{a})=\frac{m\omega}{2\sin(\omega(t_\mathrm{b}-t_\mathrm{a}))}\left[(x_\mathrm{a}^2+x_\mathrm{b}^2)\cos(\omega(t_\mathrm{b}-t_\mathrm{a}))-2x_\mathrm{a}x_\mathrm{b}\right] \tag{2.13}$$

となる[3]．この古典的な作用を用いて，調和振動子の量子振幅の古典近似

$$Z_{\mathrm{ini,fin}}^{(\mathrm{cl})}=\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_\mathrm{cl}(t_\mathrm{b},t_\mathrm{a})\right] \tag{2.14}$$

が得られる．

この物理的意味を理解するために，バネ定数 k を零（すなわち $\omega=0$）と，より簡単にしてみる．こうして，自由粒子に対する古典近似式

$$Z_{\mathrm{ini,fin}}^{(\mathrm{cl,free})}=\exp\left(\frac{\mathrm{i}m(x_\mathrm{b}-x_\mathrm{a})^2}{2\hbar(t_\mathrm{b}-t_\mathrm{a})}\right) \tag{2.15}$$

が得られる．すなわち，自由粒子の古典近似の振幅は拡散型のゆらぎを示し，その分数（広がり）は $\hbar(t_\mathrm{b}-t_\mathrm{a})$ に比例する．これは，量子ゆらぎの確率的側面を表している．

さらに，終点 $(x_\mathrm{b},t_\mathrm{b})$ を変数と見て (x,t) と表し，規格化した振幅を $\psi(x,t)$ と書くと，これは，

$$\psi(x,t)=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar(t-t_\mathrm{a})}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{\mathrm{i}m(x-x_\mathrm{a})^2}{2\hbar(t-t_\mathrm{a})}\right) \tag{2.16}$$

となる．したがって，この $\psi(x,t)$ は次の偏微分方程式を満たす：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t). \tag{2.17}$$

これは，自由粒子のシュレーディンガー方程式に他ならない．

同様にして，式 (2.10) で記述される ($k \neq 0$ の) 調和振動子の場合 (式 (2.10)) にも，古典解 (2.12) に対する作用 (2.13) に基づく振幅 (2.14) は，$t_b = t$, $x_b = x$ と書き直した変数を用いて，シュレーディンガー方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\psi(x,t) \tag{2.18}$$

を満たすことがわかる．

古典解という経路の一部だけを用いた振幅が厳密にシュレーディンガー方程式を満たすのは，ポテンシャル $V(x)$ が x の 2 次式 ($V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + (1\ \text{次式})$) で表される場合の特殊性による[3]．それは，他の経路についても，公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-a(x_1 - x)^2 - b(x - x_2)^2\right] dx = \left(\frac{\pi}{a+b}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{(x_1 - x_2)^2}{a^{-1} + b^{-1}}\right] \tag{2.19}$$

を用いて計算すると，数因子を除いて，古典近似と同じ式になることから容易に理解できる．ポテンシャルが 2 次式で表される系は，力が線形であるため，古典的にも加法性が成り立ち，量子力学の基礎方程式の線形性が見え易い情況になっていると言える．この意味で，ファインマンが最初に調和振動子の経路積分表示に目をつけたことは，我々が新しい物理の理論を開拓する際の手本となるであろう．

ガウスが誤差論で見つけたガウス分布，すなわち 2 次式の指数関数は，上の式 (2.19) のようにコンボリューションをとっても同形になったり，積分が円の面積を表すのに使われる超越数 π と関係したり，いろいろ美しい性質を持っている．

2.5 変分原理におけるラグランジアンの物理的意味

(i) 一般的考察

前節までの議論において，変分原理が重要な役割を果たすことが示された．しかも，系のハミルトニアンではなく，それからルジャンドル変換で導かれるラグランジアンが変分関数の働きをしてきた．数学的には，作用

$$S(t_{\mathrm{b}}, t_{\mathrm{a}}) = \int_{t_{\mathrm{a}}}^{t_{\mathrm{b}}} \mathscr{L}(t)dt \tag{2.20}$$

が極小また停留値となるという変分条件 (オイラー・ラグランジュ方程式) (2.8) から系の運動方程式が得られれば，$\mathscr{L}(t)$ は何でもよいという見方もある．しかし，物理法則を統一的に深く理解する理論として変分原理を捉える立場に立てば，ラグランジアンが物理的に意味のあるものとして解釈できるのが望ましいであろう．実際，運動方程式を変分原理の解として与える変分の被積分関数は一意的には決まらない．すなわち，この逆問題の解は多数存在する．可逆な力学の場合は，通常，

$$\mathscr{L}(t) = T - V; \quad T = \frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2, V = V(x(t)) \tag{2.21}$$

で与えられるラグランジアンを変分の被積分関数として用いる．しかし，次回

で述べるように，散逸力学系では，数学的に単に逆問題として解いた変分の被積分関数が物理的なものであるとは限らない[10~12]．そこで，散逸系の変分原理という長年の難問に対して，“物理的” ラグランジアンを探す指針となるように，ラグランジアン $\mathscr{L}$ の物理的意味・役割を詳しく議論しておこう．

簡単のために，ハミルトニアン $\mathscr{H}$ が時間によらない場合を考える．すなわち，$\mathscr{H} = T + V = E$ (一定) とする．ここで，保存力の場合には，$V = V(x)$ は力 $F(x)$ を用いて

$$V(x) = -\int_{x_0}^{x} F(x')dx' + E \tag{2.22}$$

の形に書ける．ただし，ポテンシャル V の基準を $x = x_0$ のとき $V = E$ にとった．当然のことながら，エネルギー保存則 $\mathscr{H} = E$ を時間 t で微分すると式

$$(m\ddot{x}_{\rm cl}(t) - F(x_{\rm cl}(t)))\dot{x}_{\rm cl}(t) = 0 \tag{2.23}$$

となる．

要するに，運動方程式の解 $x_{\rm cl}(t)$ とは限らない任意の関数 $x(t)$ に対して，積分

$$\hat{S}(t_{\rm b}, t_{\rm a}) = \int_{t_{\rm a}}^{t_{\rm b}} \left(T(\dot{x}(t)) + \int_{x_0}^{x(t)} F(x)dx \right) dt \equiv S_T + S_W \tag{2.24}$$

を考えると，式 (2.22) などから，これは

$$\hat{S}(t_{\rm b}, t_{\rm a}) = S(t_{\rm b}, t_{\rm a}) + E \cdot (t_{\rm b} - t_{\rm a}) \tag{2.25}$$

となり，作用 $S(t_{\rm b}, t_{\rm a})$ を極小にする問題は，式 (2.24) で定義される $\hat{S}(t_{\rm b}, t_{\rm a})$ の極小，停留値問題に帰着する．したがって，ラグランジアン $\mathscr{L}(t)$ の時間積分である作用 S の変分問題は，力が粒子になした仕事による作用 S_W と運動エネルギーによる作用 S_T とがつり合ったときに実際の古典軌道 $x = x_{\rm cl}(t)$ が実現されることを示している．

この解釈を拡張して散逸力学系の散逸ラグランジアンを発見することに筆者は最近成功した[10~12]．

(ii) 自然落下運動を例にラグランジアンの物理的意味を再考する

上で一般的に説明した内容を図 2.2 のような自然落下運動を例にして具体的に説明し，ラグランジアンを用いた変分原理の直観的な理解を深めたい．

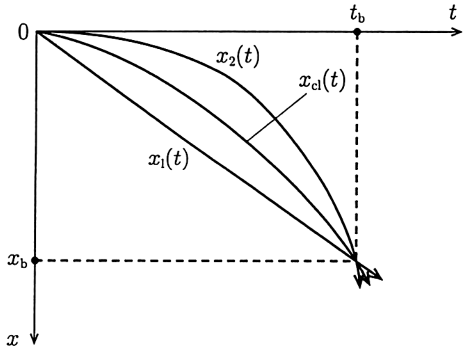


図 2.2　自然落下運動 $x_{\rm cl}(t) = \frac{1}{2}gt^2$ と変分関数 $x_1(t) = (x_b/t_b)t$ および $x_2(t) = at^2 + bt : bt_b = x - at_b^2$.

ii-a) 古典解の作用

まず古典解 $x = x_{\rm cl}(t) = \frac{1}{2}gt^2$ に対する作用 $S^{(\rm cl)} = S_T^{(\rm cl)} + S_W^{(\rm cl)}$ を求めると，

$$S_T^{(\rm cl)} = \frac{m}{2}\int_0^{t_{\rm b}} \dot{x}(t)^2 dt = \frac{1}{6}mg^2 t_{\rm b}^3, \tag{2.26}$$

および

$$S_W^{(\rm cl)} = \int_0^{t_{\rm b}} (-V(x(t)))dt = mg\int_0^{t_{\rm b}} x_{\rm cl}(t)dt = \frac{1}{6}mg^2 t_{\rm b}^3 \tag{2.27}$$

となり，2 つの作用 $S_T^{(\rm cl)}$ と $S_W^{(\rm cl)}$ とは予想通り，古典解 $x = x_{\rm cl}(t)$ に対しては一致している：$S_T^{(\rm cl)} = S_W^{(\rm cl)}$, $\quad S^{(\rm cl)} = S_T^{(\rm cl)} + S_W^{(\rm cl)} = \frac{1}{3}mg^2 t_{\rm b}^3$.

ii-b) 線形の変分関数 $x_{\rm l}(t) = (x_{\rm b}/t_{\rm b})t$ に対する作用

線形の変分関数の作用 S_T と S_W を求めると，$S_T^{(\rm l)} = \frac{1}{8}mg^2 t_{\rm b}^3$，および $S_W^{(\rm l)} = \frac{1}{4}mg^2 t_{\rm b}^3$ となり，$S_T^{(\rm l)} < S_W^{(\rm l)}$（すなわち，$S_T^{(\rm l)} \neq S_W^{(\rm l)}$）および $S^{(\rm l)} \equiv S_T^{(\rm l)} + S_W^{(\rm l)} = \frac{3}{8}mg^2 t_{\rm b}^3 > S^{(\rm cl)}$ の不等式が予想通り成り立っている．

ii-c) 古典解を含む一般の 2 次曲線に対する作用

一般の 2 次変分関数 $x(t) = at^2 + bt$ に対する 2 つの作用 $S_T(a)$ と $S_W(a)$ は，$b = (x_{\rm b} - at_{\rm b}^2)/t_{\rm b}$ として，

$$S_T(a) = \frac{m}{2}\int_0^{t_{\rm b}} \dot{x}(t)^2 dt = \left(\frac{a^2}{6} + \frac{g^2}{8}\right) mt_{\rm b}^3, \tag{2.28}$$

および

$$S_W(a) = \int_0^{t_{\rm b}} (-V(x(t)))dt = \left(-\frac{ag}{6} + \frac{g^2}{4}\right) mt_{\rm b}^3 \tag{2.29}$$

と与えられる．よって，任意の a に対する作用 $S(a) = S_T(a) + S_W(a)$ は，

$$S(a) = \left(\frac{1}{6}\left(a - \frac{g}{2}\right)^2 + \frac{1}{3}g^2\right) mt_{\rm b}^3 \geqq S^{(\rm cl)} \tag{2.30}$$

と求まる．図 2.3 のように，$a = \frac{1}{2}g$ のとき，作用 $S(a)$ は極小値 $S^{(\rm cl)} = \frac{1}{3}mgt_{\rm b}^3$ となる．また，$S_T(a)$ と $S_W(a)$ との相対的な関係は

$$\Delta S(a) \equiv S_T(a) - S_W(a) = \left(a - \frac{g}{2}\right)\left(a + \frac{3}{2}g\right) \cdot \frac{1}{6}mt_{\rm b}^3 \gtreqless 0 \tag{2.31}$$

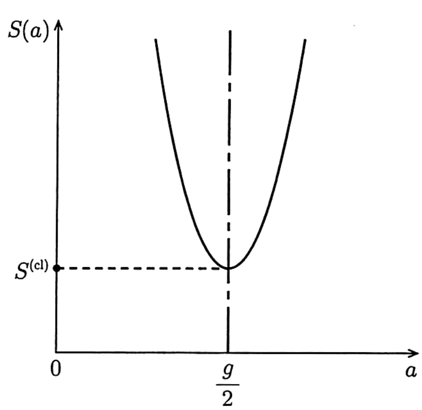


図 2.3　作用の曲率依存性（a-依存性）．$x(t) = at^2 + bt$ の曲率 κ は $\kappa = 2a/\left\{1 + (2at + b)^2\right\}^{3/2}$ で与えられる．$S(a)$ は，$a = \frac{1}{2}g$ のとき，最小値 $S^{(\rm cl)}$ をとる．

のようになる．$a=\frac{1}{2}g$，すなわち，古典的な解 $x_{\rm cl}(t)$ に対して，S_T と S_W が等しくなってバランスする．

ところで，関数 $x=f(t)\equiv at^2+bt$ に対する曲率 κ は $\kappa=\frac{2a}{(1+(2at+b)^2)^{3/2}}$ で与えられる．したがって，$2at+b$ が小さい時間領域では，$\kappa\simeq 2a$ と近似できるので，パラメータ a はこの時間領域では曲率パラメータとみてもよい．こうして，2 次の変分関数の範囲に限定すれば，作用は，図 2.3 のように，$x=x_{\rm cl}(t)$ の曲率のとき極小となる[15]．

変分関数のとり得る関数空間は無限次元であるから，曲率のような単なる一つのパラメータで作用の変化の様子を調べることはできないので，変分関数のとり方によっては，一般には，作用は $x=x_{\rm cl}(t)$ で極小とは限らず，停留値となることもある．

いずれにしても，作用がラグランジアンの時間積分で表されることの物理的意味づけができた．すなわち，運動エネルギーに対応する作用と，力による仕事による作用とのバランスで実際の古典的運動が決まる．

2.6 おわりに

今回は，ラグランジアンを用いる変分原理の物理的意味を詳しく解説し，それを用いた経路積分量子化の方法のアイデアと 2，3 の具体的な例を説明した．次回は，さらに一般的な物理系に対する経路積分の定式化を解説する．特に，今回説明したラグランジアン変分原理のアイデアを発展させた散逸系のラグランジアンとその変分原理[10~12]を詳しく述べる．

参考文献

1) P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (Oxford, 1930 and 1958 (Fourth Edition)).
2) R.P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 371 (1948).
3) R.P. ファインマン/A.R. ヒッブス著，北原和夫訳，「ファインマン経路積分と量子力学」(マグロウヒル出版，1990)．
4) R.P. Feynman, R.B. Leighton and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Vol II. Reading MA (Addison-Wesley, 1964).
5) 鈴木増雄，「物理学における変分原理——自然は無駄を嫌う」，「パリティ」2010 年 8 月号（丸善出版)．
6) 鈴木増雄，本連載第 1 回「数理科学」2014 年 6 月号（サイエンス社)．
7) 鈴木増雄，「変分原理と物理学」，「パリティ」2012 年 9 月号～11 月号（丸善出版)．
8) 大貫義郎，柏太郎，鈴木増雄，『経路積分の方法』(岩波書店，2000 年)．
9) 加藤光裕，「ニュートン力学と解析力学」，「数理科学」2014 年 4 月号（サイエンス社)．
10) M. Suzuki, *Physica* **392A**, 314 (2013) の第 5 節．
11) M. Suzuki, APPC 12 のプロシーディングス（2014 年)．
12) M. Suzuki, to be submitted to *Physica A*.
13) 吉岡大二郎，『力学』(朝倉書店，2008 年)．
14) 鈴木増雄，「変分原理と物理学」，「パリティ」2012 年 4 月号より 2013 年 5 月号まで 14 回の連載記事（丸善出版)．
15) 長沼伸一郎，『物理数学の直観的方法』ブルーバックス（講談社，2011 年)．

（すずき・ますお，東京大学名誉教授）

経路積分と量子解析

第3回

いかにして量子現象を数理的に扱うか

古典力学から量子力学へ(2)

散逸系の変分原理と経路積分量子化

鈴木 増雄

3.1 はじめに

経路積分量子化の根底には変分原理がある．そこで，前回は，自由粒子と調和振動子についての経路積分表示を述べた後に，変分原理を与えるラグランジアンの物理的意義・役割を具体例を用いて丁寧に説明した[1]．

今回は，一般の力学系に対する経路積分表示とシュレーディンガー方程式との関係を説明する．その後で，唯一未解決のままであった，散逸ダイナミクスの変分原理と散逸ラグランジアンの理論[2]を解説する．

3.2 一般的な力学系の経路積分表示とシュレーディンガー方程式との等価性

量子力学は本質的に確率的性格を持っており，粒子の振舞いは波動関数 $\psi(x,t)$ で記述され，その存在確率は $|\psi(x,t)|^2$ で与えられる．量子力学の基礎法則はこの波動関数の従うシュレーディンガー方程式で記述される．すなわち，量子力学的状態を表現するものが波動関数 $\psi(x,t)$ であり，これは古典力学のラグランジアン $\mathscr{L}(t)$ を用いて，次の経路積分（遷移振幅）と関係づけられる：

$$Z(x,t;x_0,t_0)=\int_{(x_0,t_0)}^{(x,t)}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathscr{L}(x(t),\dot{x}(t),t)\right]D[x(t)]. \tag{3.1}$$

ここで，ラグランジアン $\mathscr{L}(x(t),\dot{x}(t),t)$ は，系の運動エネルギー $T=\frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2$ とポテンシャルエネルギー $V=V(x(t))$ とを用いて

$$\mathscr{L}(t)=T-V \tag{3.2}$$

と表される[1,3~7]．また，$D[x(t)]$ はあらゆる経路 $x=x(t)$ $(t_0\le t)$ に関する経路積分を表す．系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ は $\mathscr{H}=T+V$ と表されるが，ラグランジアンは式 (3.2) のように運動エネルギー T とポテンシャルエネルギー V との差で表される．その物理的役割については前回[1] 詳しく述べた通りである．

通常は，x_0 などの過去の詳細によらず，時刻 t と空間座標 x における量子状態を扱うので，この波動関数を $\psi(x,t)$ と書く．どの状態から移ってきたかを指定する波動関数は式 (3.1)，すなわち $Z(x,t;x_0,t_0)$ に比例する量 $K(x,t;x_0,t_0)$ で表される：

$$K(x,t;x_0,t_0) \propto Z(x,t;x_0,t_0). \tag{3.3}$$

この規格化された波動関数 $K(x,t;x_0,t_0)$ を用いると，上に定義した波動関数 $\psi(x,t)$ は明らかに

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x,t;x_0,t_0)\psi(x_0,t_0)dx_0 \tag{3.4}$$

の関係をみたす[5]．

そこで，$K(x,t;x_0,t_0)$ が経路積分 (3.1) で表されるときには，$\psi(x,t)$ がシュレーディンガー方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x,t)}{dx^2} + V(x)\psi(x,t) \tag{3.5}$$

をみたすことを，数学的厳密さ[8]にこだわらずに示すことにしよう．式 (3.4) のような大局的な積分形の定式化から，局所的な表現形式である微分方程式 (3.5) を導くには，t_0 を限りなく t に近づけてみればよい．そこで，$t_0 = t - \varepsilon$, $x_0 = x + \eta$ とおいて，式 (3.4) の右辺の ε のオーダーの項をテーラー展開により求め，零と置く．その際，式 (3.4) の $K(x,t;x_0,t_0)$ としては，

$$K(x,t;x+\eta,t-\varepsilon) = \frac{1}{A}\exp\left[\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\mathscr{L}\left(x+\frac{\eta}{2}, -\frac{\eta}{\varepsilon}\right)\right] \tag{3.6}$$

とおくことができる．ただし，A は規格化定数である．ここで，$\mathscr{L}$ の中の $x(t)$ としては，中点 $\frac{1}{2}(x+x_0)$ を，$\dot{x}(t)$ としては，差分 $(x-x_0)$ と差分 $(t-t_0)$ の比を用いた．式 (3.4) の $\psi(x_0,t_0) = \psi(x+\eta,t-\varepsilon)$ も η と ε でテーラー展開する：

$$\psi(x_0,t_0) = \psi(x,t) - \varepsilon\frac{\partial\psi}{\partial t} + \eta\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \cdots . \tag{3.7}$$

ここで，すぐわかる通り，$dx_0 = d\eta$ を用いて η に関する積分を行うと，η の 1 次の寄与は零になるので，η の 2 次の項まで考慮する必要がある．実際，オーダーとしては，$\mathrm{O}(\eta^2) = \mathrm{O}(\varepsilon)$ の関係にある[5,9]．また，遷移振幅 (3.6) の指数関数を η で展開すると

$$\exp\left[\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\mathscr{L}\left(x+\frac{\eta}{2}, -\frac{\eta}{\varepsilon}\right)\right] = \exp\left[\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\left(\frac{m\eta^2}{2\varepsilon^2} - V(x) + \cdots\right)\right]$$
$$= \exp\left(\frac{\mathrm{i}m\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right)\left(1 - \frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(x) + \cdots\right) \tag{3.8}$$

となる．規格化定数 A は

$$1 = \frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\varepsilon}\eta^2\right)d\eta = \frac{1}{A}\left(\frac{2\pi\mathrm{i}\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \tag{3.9}$$

の条件から定められる．すなわち，

$$A = \left(\frac{2\pi\mathrm{i}\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \tag{3.10}$$

である．さらに，公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\eta\exp\left(\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\varepsilon}\eta^2\right)d\eta = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty}\eta^2\exp\left(\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\varepsilon}\eta^2\right)d\eta = \frac{\mathrm{i}\hbar\varepsilon}{m} \tag{3.11}$$

を用いると，式 (3.4) の右辺の ε の 1 次の項の係数は零とおけるので，シュレーディンガー方程式 (3.5) が導かれる[5,9].

こうして，経路積分による量子力学の定式化が示された．ポテンシャル $V(x)$ が与えられたとき，具体的に経路積分を求めるには，$x(t)$ のフーリエ級数表示

$$x(t) = \sum_n a_n \sin\left(\frac{n\pi t}{\tau}\right) \qquad (3.12)$$

を用いると便利である[5,9]．ただし，τ は基本周期である．ポテンシャルが x の 2 次式 $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$（調和振動子）の場合には，遷移振幅 $K(x,t;x_0,t_0)$ を厳密に求めることができる[5,9]．しかし，一般の $V(x)$ に対しては，多数のモード間の結合の項が現れるので，非線形効果に関する摂動計算に頼らざるを得ない[5]．ここでは原理的な問題に限って議論することにしよう．

3.3 変分原理の研究で残された重要な問題——散逸ダイナミクスの取扱い

すでに説明した通り[3~9]，力学，電磁気学，相対性理論など，時間反転対称性を持つ自然法則の変分原理は確立されている．残された未解決の問題は，時間反転対称性を破る自然法則の変分原理を見出すことである．すでに過去何十年も多くの人々がこの問題に取り組んできたが，どの理論も問題だらけで，物理的に見て満足できるものではない[10~15].

(i) 変分原理を与える数学的なラグランジアンと物理的なラグランジアン

一般に変関数 $x(t)$ およびその時間微分 $\dot{x}(t)$ に対する作用

$$S = \int_{t_0}^{t_1} f(x(t), \dot{x}(t), t)dt \qquad (3.13)$$

を極小または停留値にするような関数 $f(x, \dot{x}, t)$ は次のオイラー・ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}f_{\dot{x}} - f_x = \ddot{x}f_{\dot{x}\dot{x}} + \dot{x}f_{\dot{x}x} + f_{\dot{x}t} - f_x = 0 \qquad (3.14)$$

をみたす[9]．変分原理を見出す研究は，関数 f が与えられたときオイラー・ラグランジュ方程式の解 $x = x(t)$ を求めるのではなく，逆に，$x(t)$ を決める物理的法則がすでにわかっているときに，その方程式を与えるような関数 f を探すことである．これは，いわば変分原理の逆問題である．ここで大きな問題が生じる．式 (3.14) は 2 階の線形偏微分方程式であり，定数倍を除いても，この逆問題の解 $f = f(x, \dot{x}, t)$ は一意的には決まらない．数学的には，どれを用いても $x = x(t)$ を求める手段としては同じであるが，物理的には，自然法則を変分的に捉えて，その係わる現象をより深く統一的に理解できるような変分原理が望ましい．

その場合に，大変面白いことが起こり得る．単に数学的に求めた，ある 1 つのラグランジアン $\mathscr{L}^{(\mathrm{math})}(t)$ と物理的なラグランジアン $\mathscr{L}^{(\mathrm{phys})}(t)$ があって，すべての $x(t), \dot{x}(t), t$ に対し，等式

$$\int_{t_0}^{t_1} f^{(\mathrm{math})}(x(t), \dot{x}(t), t; t_0, t_1)dt = \int_{t_0}^{t_1} f^{(\mathrm{phys})}(x(t), \dot{x}(t), t)dt \qquad (3.15)$$

が成り立ち，なおかつ，2 つの被積分関数 $f^{(\mathrm{math})}$ と $f^{(\mathrm{phys})}$ とは一致しない

(全く異なる) ということがあり得る[2]. 数学的な関数 $f^{(\mathrm{math})}$ は境界条件に依存する. これから紹介する散逸ダイナミクスの変分原理の理論[2]では, このような面白いことが起こる. そして, この場合には, いろいろ大変便利なことがある. 一つは, 数学的な関数 $f^{(\mathrm{math})}$ のほうが物理的な関数 $f^{(\mathrm{phys})}$ より簡単なことが多いので, 実際の計算には前者を用い, 物理的な議論には後者を用いるというような使い分けが可能となる. これは物理の理論としては大変新奇なことではないだろうか. 物理的変分の式 $f^{(\mathrm{phys})}$ は, 後で説明するように散逸ダイナミクスの場合には経路全体に依存する汎関数で表され, それをさらに時間で積分した作用の変分のとり方が一般に困難である. しかし, 恒等式 (3.15) が存在する場合には, 通常の被積分関数 $f^{(\mathrm{math})}$ に対する変分計算をすればよいことになり, 大変都合がよい.

(ii) 粘性抵抗 (摩擦力) のある系の変分原理に関する今までの研究とその難点[10~17]

もっとも典型的な散逸ダイナミクスを記述する方程式として,

$$m\ddot{x}(t)+\zeta\dot{x}(t)=F(x(t));\quad F(x)=-\frac{dV(x)}{dx} \tag{3.16}$$

を考えることにする. ここで, 考えている粒子の質量を m, 時刻 t における空間座標を $x(t)$, ζ は粘性係数, および $F(x(t))$ は粒子に働く外力とする. この外力 $F(x(t))$ は保存力とする.

この問題に対する変分原理として提案されているものは, 筆者の視点に立てばすべて数学的なものである. 典型的な例としては,

$$f(x(t),\dot{x}(t))=\mathrm{e}^{\zeta t/m}\left(T(\dot{x}(t))-V(x(t))\right) \tag{3.17}$$

が知られている[10,12~15]. この式は, 散逸のない系のラグランジアン

$$\mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t)\equiv T(\dot{x}(t))-V(x(t)) \tag{3.18}$$

に因子 $\exp\left(\frac{\zeta t}{m}\right)$ をかけただけの単純な式であり, これを極小にする, または停留値にすることの物理的意味は不明である. オイラー・ラグランジュ方程式 (3.14) の解として式 (3.16) が得られるということだけは明らかである.

3.4 散逸ダイナミクスの物理的な変分原理

(i) 直観的な理論 (発見法的処方)

前節で扱った散逸ダイナミクスの式 (3.16) を例にして, ここでは熱エネルギーを含めたエネルギーバランス (エネルギー保存則)

$$T(\dot{x}(t))+V(x(t))+W_{\mathrm{heat}}(t)=\text{一定};\quad W_{\mathrm{heat}}(t)=\zeta\int_0^t \dot{x}(s)^2ds \tag{3.19}$$

に着目し, 変分原理を模索してみる[18]. ここで, 上式の第 3 項は, 粘性抵抗による, 時刻 0 から t までの熱の発生量全体を表す. 明らかに, 上の式を時間で微分すると,

$$\left(\frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2+\zeta\dot{x}(t)-F(x(t))\right)\dot{x}(t)=0 \tag{3.20}$$

となり, 運動方程式 (3.16) が得られる. したがって, 式 (3.19) が変分原理から

得られるように，散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\rm diss}(t)$ を設定すればよいことになる．

これからの議論は試行錯誤を重ねて発見法的に進める．今までの長年の研究[10, 12~15]は，被積分関数 f を通常の関数空間（変関数 $x(t)$，その微分 $\dot{x}(t)$ および時間 t の顕わな関数）に限定して，2 階の偏微分方程式 (3.14) を解くものであった．このような正攻法では，以下の議論でわかるように，物理的な変分原理を構成する被積分関数としての散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\rm diss}(t)$ は見つからない．このために，散逸ダイナミクスの変分原理は物理的には長年の間未解決であったものと思われる[2)]．

そこで，まずは近似的にでも，物理的な散逸ラグランジアンを探してみよう．そのヒントとして，前回のラグランジアンの物理的意味についての議論を再考する．通常の力学系のラグランジアンは，定数項を除いて，運動エネルギー T と外力のなす仕事量

$$W_{\rm dyn}(t) = \int_{x(0)}^{x(t)} F(x)dx = V(x(0)) - V(x(t)) \tag{3.21}$$

との和として構成される．ここで，$t_0 = 0$ とした．熱の発生 $W_{\rm heat}(t)$ があると，それだけ外力による仕事の粒子に与える効果が減ると考えられる．したがって，運動エネルギー $T(\dot{x}(t))$ と $(W_{\rm dyn}(t) - W_{\rm heat}(t))$ とがバランスするとみなし，直観的な散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\rm diss}^{(\text{直観})}$ は，定数項を除いて，

$$\begin{aligned}\mathscr{L}_{\rm diss}^{(\text{直観})}(t) &= T(\dot{x}(t)) + W_{\rm dyn}(t) - W_{\rm heat}(t) \\ &= T(\dot{x}(t)) + V(x(t)) - W_{\rm heat}(t) + (\text{定数})\end{aligned} \tag{3.22}$$

で与えられるとしてよいであろう．よって，直観的な散逸ラグランジアンに対する作用は

$$S_{\rm diss}^{(\text{直観})} = \int_0^{t_1} \left(T(\dot{x}(t)) + W_{\rm dyn}(t) - W_{\rm heat}(t)\right) dt \tag{3.23}$$

で与えられることになる．次の問題は，この作用の変分をどう実行するかということである．なぜならば，散逸ラグランジアン (3.22) は，今までのような通常の関数ではなく，経路に依存する汎関数 $W_{\rm diss}^{(\text{直観})}(t)$，すなわち，式 (3.19) を用いて表されているからである．関数 $\dot{x}(t)^2$ の 2 重積分の変分は

$$\begin{aligned}&\delta\left(\zeta\int_0^{t_1} dt \int_0^t \dot{x}^2(s)ds\right) = 2\zeta\int_0^{t_1} dt \int_0^t \dot{x}(s)\delta\dot{x}(s)ds \\ &= 2\zeta\left(\int_0^{t_1} \dot{x}(t)\delta x(t)dt - \int_0^{t_1} dt \int_0^t \ddot{x}(s)\delta x(s)ds\right)\end{aligned} \tag{3.24}$$

の形にまでは，部分積分によって変形できるが，依然として第 2 項の 2 重積分の処理という（今までの変分計算には現れてこなかった）新しい困難に遭遇する．上の変形式 (3.24) の第 1 項（の半分）のみを利用すると，正しい運動方程式 (3.16) が得られる．

この議論から，熱の発生の効果を表す表式 (3.19) を基にして（数因子 $\frac{1}{2}$ は別にして），適当に拡張すれば正しい散逸ラグランジアンが求まるだろうとおおよその見当がつく．

数因子 $\frac{1}{2}$ に関しては，変分原理とは直接結びつかない今までのオイラー・ラ

グランジュの式に非保存力（non-conservative force）の効果 $\Phi(t) = \frac{1}{2}\zeta\dot{x}(t)^2$（散逸関数と通常呼ばれている）を付け加えた式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{d\mathscr{L}}{d\dot{x}(t)}\right) - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial x(t)} = \frac{\partial\Phi(t)}{\partial\dot{x}(t)} \tag{3.25}$$

が参考になるであろう．ただし，$\Phi(t)$ そのままでは変分原理には役立たないが，筆者の輸送現象に対する変分原理の基本理念[18, 19)]

“定常状態では，そこに到る途中の過程を考慮に入れた積分されたエントロピー生成が最小になる”

に基づいて散逸関数 $\Phi(t)$ を時間で積分した，いわば “散逸エネルギー関数”

$$W_{\rm diss}^{(0)}(t) = -\int_0^t \Phi(s)ds = -\frac{1}{2}\zeta\int_0^t \dot{x}(s)^2 ds \tag{3.26}$$

が，散逸ダイナミクスの物理的変分原理を見出す出発点になることを次に示す．

(ii) くり込まれた散逸ラグランジアンの構成

ここの目的は，散逸ダイナミクス方程式 (3.16) を与える “物理的” 散逸ラグランジアン

$$\mathscr{L}_{\rm diss}^{(\rm phys)}(t) = \mathscr{L}_{\rm dyn}(t) + W_{\rm diss}(t) \tag{3.27}$$

を構成することである．ただし，散逸項 $W_{\rm diss}(t)$ は熱の発生と直接係る表式 $W_{\rm heat}(t) = -2W_{\rm diss}^{(0)}(t)$ を主たる項として含む “物理的な” ものであってほしい．

そこで，$W_{\rm diss}(t)$ として

$$W_{\rm diss}(t) = W_{\rm diss}^{(0)}(t) + R_{\rm diss}(t);\quad R_{\rm diss}(t) = \int_0^t Q_{\rm diss}(s)ds \tag{3.28}$$

の形を仮定し，$Q_{\rm diss}(t)$ を探すことにする．

この系の作用は，$t_1 = \tau$ とおいて，

$$\begin{aligned} S_{\rm diss} &= \int_0^\tau \mathscr{L}_{\rm diss}(t)dt = \int_0^\tau \mathscr{L}_{\rm dyn}(t)dt + \int_0^\tau W_{\rm diss}(t)dt \\ &= \frac{m}{2}\int_0^\tau \dot{x}(t)^2 dt - \int_0^\tau V(x(t))dt - \frac{\zeta}{2}\int_0^\tau dt\int_0^t \dot{x}(s)^2 ds \\ &\quad + \int_0^\tau dt\int_0^t Q_{\rm diss}(s)ds \end{aligned} \tag{3.29}$$

という 2 重積分を含む形になるので，これらの変分をとる際に，前述した通り数学的な工夫を要する．

幸いに，次の公式がこの問題を解くのに大いに役立つ：任意の関数 $f(t)$ に対して

$$\int_0^\tau dt\int_0^t f(s)ds = \int_0^\tau (\tau - t)f(t)dt \tag{3.30}$$

が成り立つ．この公式は，両辺を τ で微分してみれば，その両辺が一致し，$\tau = 0$ に対しても両辺 0 になることから容易に確かめられる．より一般に次の公式が知られている：

$$\int_0^\tau dt_1\int_0^{t_1} dt_2\cdots\int_0^{t_{n-1}} f(t_n)dt_n = \frac{1}{(n-1)!}\int_0^\tau (\tau - t)^{n-1}f(t)dt. \tag{3.31}$$

これらの公式の利用に気づくことが “物理的” 散逸ラグランジアンを見出すた

めのキーポイントの一つである．式 (3.29) の第 3 項の変分から，粘性項 $\zeta\dot{x}(t)$ が求まるように，$W_{\rm diss}(t)$ を決めたい．公式 (3.30) を用いると，式 (3.29) の最右辺の第 3 項は

$$-\frac{\zeta}{2}\int_0^\tau dt\int_0^t \dot{x}(s)^2 ds = -\frac{\zeta}{2}\int_0^\tau (\tau - t)\dot{x}(t)^2 dt \tag{3.32}$$

である．よってこの項の変分からのオイラー・ラグランジュ方程式 (3.14) への寄与は

$$\ddot{x}(t)f_{\dot{x}\dot{x}} + \dot{x}(t)f_{\dot{x}t} \to -\zeta(\tau - t)\ddot{x}(t) + \zeta\dot{x}(t) \tag{3.33}$$

となり，粘性項 $\zeta\dot{x}(t)$ が得られるが，同時に余分な項も現れる．このように質量が時間と共に変化するような効果を与える項は，くり込んで消えるようにうまく $R_{\rm diss}(t)$ を決めなければならないと思われる．しかし，そのような $R_{\rm diss}(t)$ は見つかりそうにない．例えば，次のような 3 重積分（散逸関数の多重積分）

$$\int_0^\tau R_{\rm diss}(t)dt \to \int_0^\tau dt\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}\frac{\zeta}{2}\dot{x}(t)^2 dt_2 \tag{3.34}$$

を考えると，公式 (3.31) を用いて，これは

$$\frac{1}{2!}\int_0^\tau (\tau - t)^2\left(\frac{\zeta}{2}\dot{x}(t)^2\right)dt \tag{3.35}$$

と変形できるので，オイラー・ラグランジュ方程式への寄与は

$$\frac{1}{2!}\left(\zeta(\tau - t)^2\ddot{x}(t) - \zeta(\tau - t)\dot{x}(t)\right) \tag{3.36}$$

となる．このように，どんなに高次の多重積分を付け加えても，低次が消えずに却って $(\tau - t)$ の高次が増えるばかりである．そこで，この情況を逆手にとり，無限に高次の多重積分を付け加えて（くり込んで），次の形のオイラー・ラグランジュ方程式

$$g(t)\left(m\ddot{x}(t) + \zeta\dot{x}(t) - F(x(t))\right) = 0 \tag{3.37}$$

を導くように $R_{\rm diss}(t)$ を決めることにする．もし，因子 $g(t)$ が零にならない関数となるようにとれれば，望みの運動方程式 (3.16) が得られることになる．高次のくり込みまで系統的に検討してみると，運良く上の戦略はうまく適用できることがわかった[2)]．その結果は次の通りである：

$$W_{\rm diss}(t) = \sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{\zeta}{m}\right)^n\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2\cdots\int_0^{t_{n-1}}\mathscr{L}_{\rm dyn}(t_n)dt_n, \tag{3.38}$$

および

$$g(t) = \exp\left(\frac{\zeta}{m}(t - \tau)\right). \tag{3.39}$$

これに対応する $\mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (math)}(t)$ は

$$\int_0^\tau \mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (math)}(t)dt = \int_0^\tau \mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (phys)}(t)dt \tag{3.40}$$

によって定義され，それは，公式 (3.31) を用いると，

$$\mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (math)}(t) = \mathrm{e}^{(t-\tau)\zeta/m}\mathscr{L}_{\rm dyn}(t) = \mathrm{e}^{(t-\tau)\zeta/m}\left(T(\dot{x}(t)) - V(x(t))\right) \tag{3.41}$$

で与えられることがわかる．明らかに，これは，式 (3.38) の $W_{\rm diss}(t)$ を用いた物理的ラグランジアン (3.27) とは全く異なる通常の関数である．大変興味深

いことに，これは式 (3.17) と因子 $\exp\left(-\frac{\zeta\tau}{m}\right)$ を除いて一致している．その結果，今までのラグランジアン (3.17) を用いた計算はこの因子の影響を除けば正しい結果を与えることになる．しかし，この因子の存在は非常に大きく，次回議論するように極めて本質的である．

3.5 おわりに

以上のように，時間反転対称性を破る散逸ダイナミクスに対しても物理的な散逸ラグランジアンが発見され，それを用いた変分原理が確立された．こうして，変分原理によって，不可逆過程まで含めて統一的に自然法則を表現することができるようになった．散逸ラグランジアンの中の粘性係数の 1 次の項 $W_{\text{diss}}^{(0)}(t)$ は散逸関数 $\Phi(t)$ の時間積分（に負符号つけたもの）であるから，ζ が小さいときには，散逸ラグランジアンは熱の発生量そのものを用いて与えられることになり，これは物理的である．高次のくり込みの効果も散逸関数の時間に関する多重積分で与えられるのは興味深い．散逸ラグランジアンのより直接的な導出法と経路積分量子化については次回に解説する．また，粘性係数 ζ が $\dot{x}(t)$ に依存する非線形の場合への拡張についても次回に説明する．

参考文献

1) 鈴木増雄，本連載，「数理科学」2014 年 6 月号（第 1 回）および 8 月号（第 2 回）（サイエンス社）.
2) M. Suzuki, *JPS Conf. Proc.* **1** (2014) 012128, and *Physica A* (in preparation).
3) 加藤光裕，「ニュートン力学と解析力学」，「数理科学」，2014 年 4 月号（サイエンス社）.
4) 大貫義郎，柏太郎，鈴木増雄，『経路積分の方法』（岩波書店，2000 年）.
5) R.P. ファインマン/A.R. ヒッブス著，北原和夫訳，『ファインマン経路積分と量子力学』（マグロウヒル出版，1990 年）.
6) 鈴木増雄，「物理学における変分原理――自然は無駄を嫌う」，「パリティ」2010 年 8 月号（丸善出版）.
7) 吉岡大二郎，『力学』（朝倉書店，2008 年）.
8) T. Kato, *Perturbation theory for linear operators*, Springer, 第 2 版 (1976).
9) 鈴木増雄，「変分原理と物理学」，「パリティ」2012 年 9 月号～11 月号（丸善出版）.
10) 大貫義郎，岩波講座『力学』第 1 章（岩波書店，1994 年）.
11) 佐野雅巳，「力学的エネルギー」，「数理科学」2013 年 8 月号（サイエンス社）.
12) P. Caldirola, *Il Nuovo Cimento B***77** (No.2) (1983) 241.
13) C.C. Gerry, *J. Math. Phys.* **25** (6) (1984) 1820. この論文では，変分原理よりも経路積分量子化に主眼がある．
14) H. Majima and A. Suzuki, *Ann. of Phys.* **326** (2011) 3000.
15) C-I. Um, K-H. Yeon and T.F. George, *Phys. Rep.* **362** (2002) 63.
16) C.R. Galley, *Phys. Rev. Lett.* **110** (2013) 174301. この論文では，Keldysh の 2 時間グリーン関数を用いて，しかも通常の変分原理の境界条件ではなく，初期条件のみを用いており，この理論が物理的な理論であるかどうかは検討の余地がある．この論文を教えてくれた桑原幸朗氏に感謝致します．
17) Y. Kuwahara, Y. Nakamura and Y. Yamanaka, *Phys. Lett.* **A377** (2013) 3102.
18) M. Suzuki, *Physica* **A392** (2013) 314.
19) M. Suzuki, *Physica* **A392** (2013) 4279.

（すずき・ますお，東京大学名誉教授）

経路積分と量子解析

第4回

いかにして量子現象を数理的に扱うか

古典力学から量子力学へ (3)

非線形散逸系の変分原理と経路積分量子化

鈴木 増雄

4.1 はじめに

前回[1)]は，線形の散逸系の変分原理を与えるラグランジアンを発見法的に導出した．今回は，その結果を簡潔な表式に書き直し，物理的な解釈をし易くする．このような新しくわかり易い定式化を用いて，未解決の問題として残されていた "非線形散逸系の変分原理を与える散逸ラグランジアンの構成" という課題を肯定的に解説する．これらのラグランジアンを用いると，散逸系の経路積分量子化が可能となる．その定式化を用いて，散逸系の不確定性関係式を導くことができる．これらの議論には，経路に依存した散逸ラグランジアンの時間積分としての作用の変分をとるという新しい数学的手段が必要になる．この数理的な取扱いについても詳しく説明する．

4.2 線形散逸系における物理的ラグランジアンの簡潔な表式

散逸系のラグランジアンには，単に数学的なものから，エネルギー散逸（発熱）を表す物理的な表式までいろいろある．任意の正の数 τ と解析関数 $x(t)$ に対して，恒等式

$$\int_0^\tau \mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math})}(t)dt = \int_0^\tau \mathscr{L}_{\mathrm{diss}}(t)dt \tag{4.1}$$

を満たせば，どの表式 $\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}(t)$ も変分原理のラグランジアンになり得る[1)]．変関数 $x(t)$ に対する散逸的な運動方程式

$$m\ddot{x}(t) + \zeta\dot{x}(t) - F(x) = 0 \tag{4.2}$$

を変分原理で与えるラグランジアンは，前回ふれた通り[1)]，$\gamma = \frac{\zeta}{m}$ として

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math})}(t) = \mathrm{e}^{\gamma(t-\tau)} \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t);\ \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) = \frac{m}{2}\dot{x}(t)^2 - V(x(t)) \tag{4.3}$$

で与えられるが，これは数学的な表式に過ぎず，物理的なものとは言えない[1]．このままでは，熱の発生と直接結びつかないからである．そこで，式 (4.1) を満たす（作用としては同じ値を与える）ような表式で，なおかつ熱の発生の効果

$$\zeta \int_0^t \dot{x}(s)^2 ds = (\text{粘性抵抗力}) \times (\text{距離})$$

を顕わに示すような物理的ラグランジアンをもう一度議論する．前回述べた物理的な散逸ラグランジアンの散逸項 $W_{\mathrm{diss}}(t) = \mathscr{L}_{\mathrm{diss}}(t) - \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t)$ は次のような多重積分の無限級数

$$W_{\mathrm{diss}}(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\zeta}{m}\right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t_n) dt_n \tag{4.4}$$

で表され[1]，第1項

$$W_{\mathrm{diss}}^{(1)}(t) = -\frac{\zeta}{2} \int_0^t \dot{x}(s)^2 ds + \gamma \int_0^t V(x(s)) ds \tag{4.5}$$

以外の高次の項は扱いにくく，あまり実用的な表式でない．それらの高次の項は，第1項 $W_{\mathrm{diss}}^{(1)}(t)$ へのくり込みの効果を表すものと考えられるが[1]，より物理的解釈のできる簡潔な表式が欲しい．実は，前回述べた通り，数学的ラグランジアンと物理的ラグランジアンを議論する際に，次の多重積分の変換公式が大きなヒントになった．

公式 4.1　任意の解析関数 $f(t)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^{\tau} dt \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} f(t_n) dt_n = \frac{1}{n!} \int_0^{\tau} (\tau - t)^n f(t) dt. \tag{4.6}$$

上の公式 4.1 をさらに一般化するには，次の公式が役に立つ．

公式 4.2　任意の2つの解析関数 $f(t)$ と $g(t)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^{\tau} g(\tau - t) f(t) dt = g(0) \int_0^{\tau} f(t) dt + \int_0^{\tau} dt \int_0^t g^{(1)}(t-s) f(s) ds. \tag{4.7}$$

これを証明するには，よく知られている方法であるが，両辺を τ で微分したものが等しいことを確めればよい（$\tau = 0$ に対して両辺が等しいことは明らかである）．この公式 4.2 を漸化的にくり返すと，次の公式が容易に導かれる．

公式 4.3　任意の自然数 n と任意の2つの解析関数 $f(t)$ と $g(t)$ に対して次式が成り立つ[2]：

$$\int_0^{\tau} g(\tau - t) f(t) dt = \int_0^{\tau} dt \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} g^{(n)}(t_{n-1} - t_n) f(t_n) dt_n + \sum_{k=1}^{n-1} g^{(k)}(0) \int_0^{\tau} dt \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{k-1}} f(t_k) dt_k. \tag{4.8}$$

特に，$g(t)=t^n$ とおけば，式 (4.6) が得られる．この公式は後で有効に用いられる．さらに，次のように一般化することもできる[2)]．

公式 4.4 任意の解析関数 $f(t,s)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^\tau f(\tau,t)dt = \int_0^\tau dt \int_0^t f_t(t,s)ds + \int_0^\tau f(t,t)dt. \tag{4.9}$$

ただし，$f_t(t,s)$ は $f(t,s)$ の t に関する偏微分を表す．

この公式は，2 変数関数 $f(t,s)$ の長方形の領域 $\{0 \le t \le \tau, 0 \le s \le \tau\}$ を 2 つの 3 角領域に分割した次の公式から容易に導かれる．

公式 4.5 任意の解析関数 $f(t,s)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^\tau dt \int_0^\tau f(t,s)ds = \int_0^\tau dt \int_0^t f(t,s)ds + \int_0^\tau dt \int_0^t f(s,t)ds. \tag{4.10}$$

ここまで一般化すると当り前の公式に見えてしまうが，公式 4.1〜4.5 は大変有用な公式であり，後で有効に用いられる．

ついでながら，これらの公式（いやすべての公式）に共通な特徴は変数 t に時間のような次元を与えて考えると，両辺の次元が一致することである．このことは，物理分野の人にとっては自明のことであるが，数学の公式を捉えるときにも大変役に立つ．例えば，公式 4.1，すなわち式 (4.6) でみると，$(n+1)$ 重積分が 1 重積分に変換されているが，右辺の被積分関数の t の次元は，両辺共通の $f(t)$ の次元を除いて，$(n+1)$ 次元になっており，両辺の次元が一致していることがわかる．逆に，この自明な事実を用いると，式 (4.6) の $f(t)$ にかかる因子 $(\tau-t)^n$ の中が n であることが容易に思い出すことができ，便利である．次元を考えるということは，数式を幾何学的に捉えることにも通じる．例えば，物理でよく使われる定積分の公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \tag{4.11}$$

には，π が入っている．これを幾何学的に解釈し，半径 R の円の面積 πR^2 または円周 $2\pi R$ と結びつければ，式 (4.11) の証明法がわかることになる．これもよく知られている通りである（すなわち，式 (4.11) の両辺を二乗して面積分に変換する）．

少し数学の公式に深入りしたが，これらの公式を準備すれば，我々の物理の問題の解決へのヒントが得られる．物理的な散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{phys})}$ は，熱の発生と関係した式 (4.5) からも予想されるように，経路に依存した表式，すなわち時間 t の積分で表されると考えられる．そして，式 (4.1) に対応して，

$$\int_0^\tau \mathrm{e}^{-\gamma(\tau-t)} \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t)dt = \int_0^\tau \mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{phys})}(t)dt \tag{4.12}$$

が成り立つはずである．公式 4.2 において $g(t)=\mathrm{e}^{-\gamma t}$ とおいた次の公式を用いることに気づくことが，今の問題を解くキーポイントの一つである．

公式 4.6　任意の解析関数 $f(t)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^\tau e^{-\gamma(\tau-t)}f(t)dt=\int_0^\tau f(t)dt-\gamma\int_0^\tau dt\int_0^t e^{-\gamma(t-s)}f(s)ds. \quad (4.13)$$

こうして，上の式 (4.13) で $f(t)=\mathscr{L}_{\rm dyn}(t)$ とおき，右辺の t 積分を一つにまとめて，式 (4.12) と比較すれば，次の簡潔な物理的ラグランジアンが求まる：

$$\mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (phys)}(t)=\mathscr{L}_{\rm dyn}(t)-\gamma\int_0^t e^{-\gamma(t-s)}\mathscr{L}_{\rm dyn}(s)ds. \quad (4.14)$$

すなわち，散逸ラグランジアンの散逸項 $W_{\rm diss}(t)$ は

$$\begin{aligned}W_{\rm diss}(t)&\equiv\mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (phys)}(t)-\mathscr{L}_{\rm dyn}(t)\\&=-\frac{\zeta}{2}\int_0^t e^{-\gamma(t-s)}\dot{x}(s)^2ds+\gamma\int_0^t e^{-\gamma(t-s)}V(x(s))ds \quad (4.15)\end{aligned}$$

と表される[2)]．式 (4.15) の第 1 項が望み通り，熱の発生の効果を表しているが，散逸エネルギーそのもの（式 (4.5) の右辺第 1 項）ではなく，重みつき（コンボリューション，すなわち $\exp(-\gamma(\tau-t))$ の因子つき積分の形）になっているところが大変興味深い．定常状態の変分原理[3)]では，それは重みなしの時間積分で表されるが，過渡現象の変分原理ではさらに重みまで現れることは注目すべきことである．オンサーガー・マクラップ[4)]の変分理論では瞬間のエネルギー散逸を扱っているが，新理論では重みは遠い過去になるほど小さくなるが途中の過程まで考慮に入れたエネルギー散逸（エントロピー生成）を扱うところが本質的である．

さらに，興味深いことに，式 (4.14) の右辺の第 2 項の積分因子の指数関数 $\exp(-\gamma(t-s))$ をテーラー展開し，公式 4.1，すなわち式 (4.6) を用いると，前回くり込みの処法で導いた，多重積分の無限級数 (4.4) が直接導かれる．

こうして，線形系の散逸ダイナミクスに対する変分原理の問題は物理的にも見事に解決された．

4.3 非線形な散逸系における数学的ラグランジアンの導出

ここでは，さらに粘性係数 ζ が速度 $\dot{x}(t)$ に $\zeta=\zeta(\dot{x}(t))$ のように依存する非線形散逸系の変分原理[2)]を説明する．すなわち，運動方程式

$$m\ddot{x}(t)+\zeta(\dot{x}(t))\dot{x}(t)-F(x(t))=0 \quad (4.16)$$

で記述される非線形散逸ダイナミクスを変分原理から導く．

ここではまず第一に，数学的な散逸ラグランジアンを探すことにする．これも長年の難問であるから，正攻法ではうまくいかない．すなわち，オイラー・ラグランジュ方程式

$$\ddot{x}f_{\dot{x}\dot{x}}+\dot{x}f_{\dot{x}x}+f_{\dot{x}t}-f_x=0 \quad (4.17)$$

から運動方程式 (4.16) が得られるように，作用の被積分関数 $f(x(t),\dot{x}(t),t)$ を求めるという‘変分理論の逆問題’を解くことには，今までのところ誰も成功していない．そこで，ここでも発見法的に話を進める．前節で解説した線形系の数学的な散逸ラグランジアン (4.3) は，あえて積分を使って書くと

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math,linear})}(t;\tau) = \exp\left(\int_{\tau}^{t} \gamma ds\right) \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) \tag{4.18}$$

となる．これを γ が $\gamma = \frac{1}{m}\zeta(\dot{x}(t)) \equiv \gamma(\dot{x}(t))$ のように，速度 $\dot{x}(t)$ に依存する場合に式 (4.18) を拡張する，もっともナイーヴな形は，$0 \leq t \leq \tau$ に対して

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{trial})}(t;\tau) = \exp\left(\int_{\tau}^{t} \gamma(\dot{x}(s))ds\right) \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) \tag{4.19}$$

であろう．一見，オイラー・ラグランジュ方程式 (4.17) の $f_{\dot{x}t}$ に相当する項から，式 (4.16) の散逸項 $\zeta(\dot{x}(t))\dot{x}(t)$ が出そうに見えるが，この議論は数学的に全く誤りである（これで「できた」と思った人は過去にもいるのではなかろうか．筆者もその一人である！）．式 (4.18) のように，ラグランジアンそのものが $x(t)$ の経路によるような汎関数で表されるような全く新しい変分理論[2)]では，オイラー・ラグランジュ方程式 (4.17) は使えない．式 (4.19) の積分の中の $\dot{x}(s)$ も $\dot{x}(s) + \delta\dot{x}(s)$ のように変化させて変分をとらなければならないからである．

そこで，オイラー・ラグランジュ方程式が使えるようにするため，変分をとる際に指数因子は時間微分だけで済むように，変関数 $x(t)$ ではなく，ある固定した関数 $\dot{x}_*(t)$（後でうまく決める）を用いた積分を考え，非線形系 (4.16) の数学的な散逸ラグランジアンとして

$$\boxed{\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math})}(t;\tau) = \exp\left(\int_{\tau}^{t} \gamma(\dot{x}_*(s))ds\right) \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t)} \tag{4.20}$$

を導入する[2)]．これは，$x_*(t)$ を後で適当に決める固定された関数とみなせば，$x(t), \dot{x}(t)$ および時間 t の通常の関数であるから，

$$作用\ I = \int_{0}^{\tau} \mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math})}(t;\tau)dt = 極値 \tag{4.21}$$

とするような変関数 $x(t)$ は，オイラー・ラグランジュ方程式 (4.17) より，零でない指数因子を除いて

$$m\ddot{x}(t) + \zeta(\dot{x}_*(t))\dot{x}(t) - F(x(t)) = 0 \tag{4.22}$$

という，$x(t)$ に関する，みかけ上（有効的に）線形の方程式をみたす．この方程式 (4.22) を解くと，その解には $\dot{x}_*(t)$ が含まれる．そこで，この段階で条件

$$x(t) = x_*(t),\ すなわち,\ \dot{x}(t) = \dot{x}_*(t) \tag{4.23}$$

をつけることにする．こうすると，この新変分原理から求めた解は，もとの方程式 (4.16) の解と一致し，同じ非線形な散逸ダイナミクスを記述することになる．

この非線形な散逸ダイナミクスの変分原理では，粘性係数 $\zeta(\dot{x}(t))$ すなわち

$\gamma(\dot{x}(t)) = \frac{1}{m}\zeta(\dot{x}(t))$ の中の $\dot{x}(t)$ は，変関数とみるのではなく，実際に起こる軌道 $x_*(t)$ の微分 $\dot{x}_*(t)$ の関数として捉えることが妥当であるという概念的な主張が提唱されている．次の節で求める，非線形な散逸系の物理的ラグランジアンにおいては，これは概念的に重要な意味を持つことを強調しておきたい．

4.4 一般の非線形系における物理的な散逸ラグランジアン

前節で求めた数学的な散逸ラグランジアンを基にして，熱の発生と直接係わるような，非線形系の物理的な散逸ラグランジアンを探してみよう．式 (4.20) を関係式 (4.1) に代入して，4.2 節で示した数学的な公式 4.4，すなわち式 (4.9) を用いると非線形系の物理的な散逸ラグランジアンは

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{phys})}(t) = \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) - \int_0^t \gamma(\dot{x}_*(t')) \exp\left(\int_t^{t'} \gamma(\dot{x}_*(s))ds\right) \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t')dt' \tag{4.24}$$

で与えられることがわかる．この式の右辺の第 2 項は

$$\begin{aligned} W_{\mathrm{diss}}(t) = &-\frac{1}{2}\int_0^t \zeta(\dot{x}_*(t'))\dot{x}(t')^2 \exp\left(\int_t^{t'} \gamma(\dot{x}_*(s))ds\right) dt' \\ &+ \int_0^t \gamma(\dot{x}_*(t')) \exp\left(\int_t^{t'} \gamma(\dot{x}_*(s))ds\right) V(x(t'))dt' \end{aligned} \tag{4.25}$$

と書き表せるから，式 (4.25) の右辺第 1 項が，線形系の場合と同様に，重みつきの熱の発生量を表しており，式 (4.24) は望み通り物理的であることがわかる．ただし，$\zeta(\dot{x}(t)) > 0$ の条件が必要である．この条件の下では，式 (4.24) と式 (4.25) の指数因子は，$t' < t$ の時間領域で

$$\exp\left(\int_t^{t'} \gamma(\dot{x}_*(s))ds\right) = \exp\left(-\frac{1}{m}\int_{t'}^t \zeta(\dot{x}_*(s))ds\right) < 1 \tag{4.26}$$

となり，しかも，熱の発生の時刻 t' が運動の時刻 t から遠くなるほど，変分への熱の発生の効き方が次式

$$\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{1}{m}\int_{t'}^t \zeta(\dot{x}_*(s))ds\right)\zeta(\dot{x}_*(t'))\dot{x}(t')^2 \tag{4.27}$$

に比例して小さくなることに注意してほしい．さらに，この変分理論の特徴としては，粘性係数の時間依存性が真の運動 $x_*(t)$ で決まることである．もし，この粘性係数 ζ が変関数 $\dot{x}(t)$ そのもので変化するような変分関数すなわちラグランジアンを探し，たとえ見つかったとしても，それはあまりにも複雑であり物理的に解釈し難いものであろう．そういう変分関数は存在しないのかもしれない．少なくとも，比較的簡潔で物理的な散逸ラグランジアン (4.24) が見つかったことは大きな前進である．いずれにしても，以上のように非線形系の散逸ダイナミクスを変分原理で扱うことも可能となった．

4.5 多様な変分原理—より簡潔な物理的散逸ラグランジアン

すでに述べた通り，変分原理を与える変分関数は一意的ではなく，多様である．要は物理的に解釈し易いラグランジアンを見出すことである．式 (4.14) で与えた表式がもっとも簡潔な物理的ラグランジアンに見えるが，それを具体的に書き表すと，式 (4.15) のようになり，第 1 項は望み通り熱の発生を表しているものの，第 2 項が物理的に捉えにくい．そこで，この第 2 項をむしろ，式 (4.14) のポテンシャル項 $-V(x(t))$ とまとめてみることにする．再び，公式 4.6 を用いて導かれる次の公式に着目する：

$$\int_0^\tau \left(V(t) - \gamma \int_0^t \mathrm{e}^{-\gamma(t-s)} V(s) ds \right) dt = \int_0^\tau \mathrm{e}^{-\gamma(\tau-t)} V(t) dt. \quad (4.28)$$

ただし，$V(t) = V(x(t))$ である．上の関係式に気づくと，次のような，より簡潔な物理的散逸ラグランジアン

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{phys})}(t;\tau) = \frac{m}{2}\dot{x}(t)^2 - \mathrm{e}^{-\gamma(\tau-t)} V(x(t)) - \frac{\zeta}{2} \int_0^t \mathrm{e}^{-\gamma(t-s)} \dot{x}(s)^2 ds \quad (4.29)$$

が見出される[2)]．式 (4.14) には，時間の区間 $0 \leq t \leq \tau$ の端 τ は含まれていないが，式 (4.29) にはそれが含まれているのが特徴である．しかも，$t = \tau$ で式 (4.29) の第 2 項は $V(x(t))$ そのものになり，第 1 項と合わせて通常の力学系のラグランジアンとなる．要するに，式 (4.29) の第 2 項は，散逸効果でくり込まれたポテンシャルと解釈でき，式 (4.29) は全体として物理的にもっともわかり易い散逸ラグランジアンであると言える[2)]．これは非線形系に拡張できる．

4.6 散逸ダイナミクスの経路積分量子化

散逸ダイナミクスのラグランジアン $\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}(t)$ が求まったので，これを用いた経路積分

$$Z(\tau, 0) = \int_{\mathrm{ini}}^{\mathrm{fin}} \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_0^\tau \mathscr{L}_{\mathrm{diss}}(t) dt \right] D[x(t)] \quad (4.30)$$

によって，この散逸系を量子化することができる．不確定性関係などの物理的な計算をする場合でも，$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math})}(t)$ を用いると便利である．今までの多くの計算結果の問題点[5~10)]は因子 $\exp\left(-\frac{\zeta\tau}{m}\right)$ を考慮すると解決する[2)]．例えば，不確定性関係式は式 (4.3) を用いると，$\langle \Delta x \Delta p \rangle_t \geq \frac{\hbar}{2} \exp\left(-\frac{\zeta\tau}{m}\right)$ となり[2)]，右辺が $\frac{\hbar}{2}$ より小さくなり困難が生じるが，新しい理論では，$0 \leq t \leq \tau$ という変分の時間領域内で，

$$\langle \Delta x \Delta p \rangle_t \geq \frac{\hbar}{2} \exp\left(\frac{\zeta}{m}(\tau - t) \right) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.31)$$

となり，物理的な結果を与える[2)]．

非線形な散逸系 (4.16) を経路積分量子化する場合には，数学的ラグランジアン (4.20) を用いるのが便利である．なぜなら，関係式 (4.1) によって作用は同

じになるからである．ただし，粘性係数の時間依存性は真の運動 $x_*(t)$ の微分 $\dot{x}_*(t)$ で与えられるものとする．

4.7 おわりに

物理を変分原理で捉えることは物理法則やそれに基づく物理現象を概念的に深く理解するために極めて重要である[11,12]．散逸系の変分原理が見つかったことにより，時間反転対称性を破る散逸系まで含めて，物理法則を変分原理により統一的に扱うことができるようになった．定常系の変分原理[3]でも瞬間のエントロピー生成ではなく時間積分された量が非線形では本質であることが筆者により指摘されたが，時間の矢が重要な意味を持つ不可逆現象の世界では，対象とする現象の起こる時刻に近いエネルギー散逸（発熱）ほど変分に大きく効く．これは不可逆現象を概念的に捉える際に深い示唆を与える．上に説明した散逸系の変分原理と散逸ラグランジアンはいろいろな応用が将来期待される．これらの散逸ラグランジアンを用いることにより，古典的な散逸系の経路積分量子化が可能となり，散逸効果をとり入れた不確定性関係式も導けることになった．

参考文献

1) 鈴木増雄，本連載第 3 回，「数理科学」2014 年 9 月号（サイエンス社）．
2) M. Suzuki, *Physica A*, submitted.
3) M. Suzuki, *Physica A* **392** (2013) 314, 4279.
4) L. Onsager and S. Machlup, *Phys. Rev.* **91** (1953) 1505.
5) 大貫義郎，岩波講座『力学』第 1 章（岩波書店，1994 年）．
6) 佐野雅巳，「力学的エネルギー」，「数理科学」2013 年 8 月号（サイエンス社）．
7) P. Caldirola, *Il Nuevo Cimento B* **77** (No.2) (1983) 241.
8) C.C. Gerry, *J. Math. Phys.* **25** (6) (1984) 1820. この論文では，変分原理よりも経路積分量子化に主眼がある．
9) H. Majima and A. Suzuki, *Ann. of Phys.* **326** (2011) 3000.
10) C-I. Um, K-H. Yeon and T.F. George, *Phys. Rep.* **362** (2002) 63.
11) 鈴木増雄，「物理学における変分原理——自然は無駄を嫌う」，「パリティ」2010 年 8 月号（丸善出版）．
12) 鈴木増雄，「変分原理と物理学」，「パリティ」2012 年 4 月号，2013 年 5 月号（丸善出版）．

（すずき・ますお，東京大学名誉教授）

経路積分と量子解析

いかにして量子現象を数理的に扱うか

第5回

量子古典対応(1)

非可換系を可換系で表現する

鈴木 増雄

5.1 はじめに

今までは，古典的な運動の法則が与えられたとき，それを量子的な法則として捉える手段として経路積分が非常に有効であることを解説してきた[1]．今回から，その逆の定式化について説明する．すなわち，もともと量子力学の枠組みで導入され定義される物理系（例えばディラックの相対論的電子論で導入されたスピンとその多体系）を古典表示で扱う．その中心的概念は量子古典対応[2~8]である．

この対応関係を利用することにより，量子系の計算機シミュレーションが可能となり，量子モンテカルロ法が開発された[2,5,7,9]．その基本的なアイデアと実際の応用例[9,10]を解説する．

また，量子古典対応関係を導く基礎になる数学公式であるトロッター公式[11~13]およびその拡張，特に筆者が開発した高次の指数積分解公式を詳しく説明する[14,15]．

5.2 量子と古典のかけはし

一般に，量子力学的な系は，非可換な演算子からなるハミルトニアン $\mathscr{H}$ で記述される．その系の状態 $|\Psi(t)\rangle$ の時間発展は，$\mathscr{H}$ の指数演算子を用いて

$$|\Psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{\frac{t}{i\hbar}\mathscr{H}}|\Psi(0)\rangle \tag{5.1}$$

と表される．これを具体的に求めるには，$\mathscr{H}$ を記述するヒルベルト空間の任意の正規直交基底 $\{|\alpha\rangle\}$，$|\alpha'\rangle$ の間の行列要素（すなわち，遷移行列要素）

$$\langle\alpha|\exp(x\mathscr{H})|\alpha'\rangle \equiv T_{\alpha\alpha'}(x) \tag{5.2}$$

を計算すればよい．ハミルトニアン $\mathscr{H}$ が解析的に対角化できる場合は例外的であり，通常は対角化が困難である．そこで，$\mathscr{H}$ を対角化しないで式 (5.2) を求める一般的な処法をこれから説明する．それが量子古典対応の考え方である．まず，指数関数の特徴を利用して

$$\begin{aligned} T_{\alpha\alpha'}(x) &= \langle\alpha|\left(\mathrm{e}^{\frac{x}{n}\mathscr{H}}\right)^n|\alpha'\rangle \\ &= \sum_{\alpha_1}\sum_{\alpha_2}\cdots\sum_{\alpha_{n-1}} T_{\alpha\alpha_1}\left(\frac{x}{n}\right)T_{\alpha_1\alpha_2}\left(\frac{x}{n}\right)\cdots T_{\alpha_{n-1}\alpha'}\left(\frac{x}{n}\right) \end{aligned} \tag{5.3}$$

と変形する．ここで，$\frac{x}{n}\mathscr{H}$ の大きさ（ノルム）が充分小さくなるくらい，n を大きくとれば，式 (5.3) の各部分の行列要素 $T_{\alpha_j\alpha_{j+1}}\left(\frac{x}{n}\right)$ を精度良く求めることは後で述べるように可能である[2~15]．近似的な行列要素 $\tilde{T}_{\alpha_j\alpha_{j+1}}\left(\frac{x}{n}\right)$ を構成する際に留意すべき重要なことは次の事項である．

- 元の系の相互作用が短距離力の場合には，近似的に構成した $\tilde{T}$ を幾何学的に表現した（格子上の）相互作用もまた短距離力になること（必ずしも自明でない）．
- 元の系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ の対称性を保持すること．例えば，スピン系の場合の内部対称性（O(3) 対称性など）を保つ近似を作ること．
- 近似の精度を上げ，なおかつ収束性・安定性を良くすること．

このように，$T_{\alpha_j\alpha_{j+1}}\left(\frac{x}{n}\right)$ に対する何らかの近似公式を用いて行列要素 $T_{\alpha\alpha'}(x)$ をパラメータの組（$\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_{n-1}$）で表すと，これは量子的な物理量を古典的な変数で記述することになる．この量子と古典のかけはしを具体的に実行する一般的な方法を次に説明する．

5.3 トロッター公式と ST 変換

前節に述べた 3 つの留意すべき条件をみたすように量子系の物理量を古典変数を用いて記述するために，次のいわゆるトロッター公式[11]

$$\mathrm{e}^{x(A+B)} = \lim_{n\to\infty}\left(\mathrm{e}^{\frac{x}{n}A}\mathrm{e}^{\frac{x}{n}B}\right)^n, \tag{5.4}$$

または，拡張されたトロッター公式[13]

$$\mathrm{e}^{x(A_1+A_2+\cdots+A_r)} = \lim_{n\to\infty}\left(\mathrm{e}^{\frac{x}{n}A_1}\mathrm{e}^{\frac{x}{n}A_2}\cdots\mathrm{e}^{\frac{x}{n}A_r}\right)^n \tag{5.5}$$

を利用する[3]．ここで，$A_1,A_2,\cdots,A_r$ は互いには非可換であっても，それぞれ個別には簡単に対角化可能であり，それらの指数関数 $\left\{\exp\left(\frac{x}{n}A_j\right)\right\}$ の行列要素も容易に求まるものとする．後で具体例でも示す通り，互いに非可換な演算子 $\mathscr{H}_1,\mathscr{H}_2,\cdots,\mathscr{H}_r$ の和からなるハミルトニアン

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_1+\mathscr{H}_2+\cdots+\mathscr{H}_r \tag{5.6}$$

に対して，この分け方をうまく工夫し，式 (5.3) の $T\left(\frac{x}{n}\right)$ にトロッター公式を

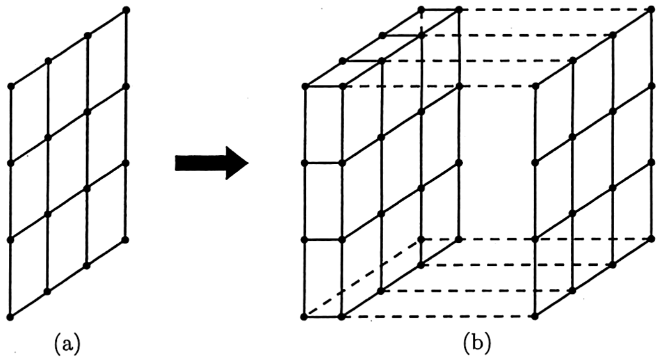


図 5.1　$d=2$ としたときの量子系とそれに対応する古典系．(a) 2 次元量子系，(b) 3 次元古典系．

適用して得られる表式を物理的視点から幾何学的に解釈すると[3]，図 5.1 のように，d 次元量子系が $(d+1)$ 次元古典系に変換されることになる[2]．この変換（等価性）は，しばしば ST 変換（鈴木–トロッター変換）と呼ばれ，多くの問題に応用されている[4~10]．

5.4 最初の適用例—量子スピン系

(i) 等価性研究の歴史的背景

筆者が大学院生時代に単独で書いた最初の頃の論文は，異なる 2 つの物理系（の問題）の間の数理的関係の研究に関するものであった．一つは，磁場のないスピン系の解から磁場のあるスピン系の解を求める公式に関するものである[16]．もう一つは，同一の物理系における異なる物理量の間の一般的な相関等式を見つけた論文である[17]．これは 2 頁足らずの短い論文であるが，部分的な自由度の消去など，今風に言えば「くり込み的な処法」に近い方法も使用されており，無数の相関等式が導入され，実に多くの研究に利用されている[18]．この流れの研究はその後もいつまでも続いている．

異なる 2 つのモデルの間の等価性にもいろいろと興味深いものが多い．例えば，図 5.2 に示すような 4 つのベクトルを状態変数に持つ系は，次の対応によって，2 つの独立なイジングスピン系 (S_i, S_i') と等価になる[19]：

$$\boldsymbol{e}_1 \leftrightarrow (1,1), \quad \boldsymbol{e}_2 \leftrightarrow (1,-1), \quad \boldsymbol{e}_3 \leftrightarrow (-1,1), \quad \boldsymbol{e}_4 \leftrightarrow (-1,-1). \tag{5.7}$$

すなわち，ベクトルポッツモデルの相互作用 $\mathscr{H}_{ij} = -J(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j)$ は，

$$-J(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j) = -\frac{J}{2}(S_i \cdot S_j + S_i' \cdot S_j') \tag{5.8}$$

の関係式により，それは，2 つの独立なイジングモデルで表される．しかも，相互作用は元の系の相互作用の半分である．

このように異なる物理系の間の等価性が示されると，一方の系の性質から，それと等価なもう一つの系の物理的性質がわかることになり，大変便利である．

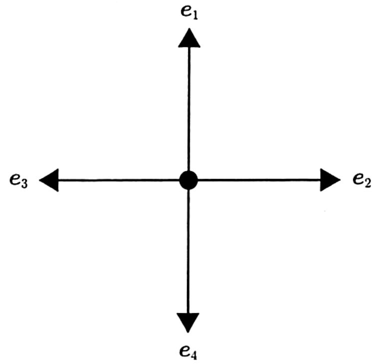


図 5.2　ベクトルポッツモデルの 4 状態 e_1, e_2, e_3 および e_4.

しかし，多くの場合に，興味深い系は解析的に解くのが困難である．解けない問題を解けない問題に変換して何の役に立つのかという批判もあった．ところで，今から半世紀前はちょうど電子計算機が開発され始めた頃であった．筆者は子供の頃からエレクトロニクスに興味があり，コンピューターの応用には強く心をひかれ，物理系のシミュレーションに興味を持っていたので，d 次元量子系と $(d+1)$ 次元古典系との等価性は，量子系を計算機でシミュレートするのに使えると思いついた[3~5]．こうして，量子モンテカルロ法の一般的定式化へと進んだ[3,5]．

(ii) 1 粒子量子系（0 次元）と 1 次元古典系との等価性

考え方の基本を説明するために，もっとも簡単な 1 粒子の問題を例として扱うことにする．しかも離散的表現に適したスピンを例に取り上げる．スピン $\frac{1}{2}$ に対応してパウリ行列 $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ を扱うことにする．これらは，σ^z を対角化した表示を用いると，次の 2 行 2 列の行列で表される：

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{5.9}$$

また，これらは次の交換関係などをみたす：

$$\begin{aligned} &[\sigma^x, \sigma^y] = \sigma^x\sigma^y - \sigma^y\sigma^x = 2\mathrm{i}\sigma^z, \\ &\sigma^x\sigma^y = -\sigma^y\sigma^x, \quad \sigma^y\sigma^z = -\sigma^z\sigma^y, \quad \sigma^z\sigma^x = -\sigma^x\sigma^z \\ &(\sigma^x)^2 = (\sigma^y)^2 = (\sigma^z)^2 = E \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{5.10}$$

ただし，単位行列 E は物理では単に数字の 1 で表されることが多い．

これらのパウリ行列 $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ を用いて，1 粒子のハミルトニアン $\mathscr{H}_1$ が次のように与えられるものとする：

$$\mathscr{H}_1 = -\mu_{\mathrm{B}} H\sigma^z - \Gamma\sigma^x. \tag{5.11}$$

ただし，$\mathscr{H}$ は磁場を表し，Γ はスピン反転の効果を与える．これは 2 行 2 列のエルミート行列であるから，容易に対角化でき，その固有値は $\pm\{(\mu_{\mathrm{B}}H)^2 + \Gamma^2\}^{1/2}$

となる．したがって，(5.11) の状態和 $Z_1(\beta)$ は

$$Z_1(\beta) = \mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}_1} = 2\cosh\left(\beta\sqrt{(\mu_\mathrm{B}H)^2+\Gamma^2}\right) \tag{5.12}$$

と与えられる．これをわざわざ一度量子系を古典系に変換する方法を用いて議論すると，$h_n = \frac{1}{n}\beta\mu_\mathrm{B}H$, $\gamma_n = \frac{1}{n}\beta\Gamma$ を用いて

$$\begin{aligned} Z_1(\beta) &= \lim_{n\to\infty} \mathrm{Tr}\ \left(\mathrm{e}^{h_n\sigma^z}\mathrm{e}^{\gamma_n\sigma^x}\right)^n \\ &= \lim_{n\to\infty}\sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_2=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_n=\pm1}\langle\sigma_1|\mathrm{e}^{h_n\sigma^z}|\sigma_1\rangle\langle\sigma_1|\mathrm{e}^{\gamma_n\sigma^x}|\sigma_2\rangle \\ &\quad \times\langle\sigma_2|\mathrm{e}^{h_n\sigma^z}|\sigma_2\rangle\langle\sigma_2|\mathrm{e}^{\gamma_n\sigma^x}|\sigma_3\rangle\cdots\langle\sigma_n|\mathrm{e}^{h_n\sigma^z}|\sigma_n\rangle\langle\sigma_n|\mathrm{e}^{\gamma_n\sigma^x}|\sigma_1\rangle \end{aligned} \tag{5.13}$$

と書ける．ただし，$|\sigma_j\rangle$ は σ^z の（固有値が σ_j の）固有状態を表す：

$$\sigma^z|\sigma_j\rangle = \sigma_j|\sigma_j\rangle. \tag{5.14}$$

この表示では，$\exp(h_n\sigma^z)$ は対角成分のみを持つことを用いて，式 (5.13) の中間状態の数を $2n$ から n に半減させた．ここで，式 (5.13) の 2 種類の行列要素は容易に求まり，次のようになる：

$$\langle\sigma_j|\mathrm{e}^{h_n\sigma^z}|\sigma_j\rangle = \mathrm{e}^{h_n\sigma^j}, \quad \langle\sigma_j|\mathrm{e}^{\gamma_n\sigma^x}|\sigma_{j+1}\rangle = \left(\frac{\sinh(2\gamma_n)}{2}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{K_n\sigma_j\sigma_{j+1}}. \tag{5.15}$$

$$\text{ただし，} K_n = \frac{1}{2}\log\coth\gamma_n. \tag{5.16}$$

こうして，1 粒子の状態和 $Z_1(\beta)$ は，次のように 1 次元イジングモデルの状態和に変換される：

$$Z_1(\beta) = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{\sinh 2\gamma_n}{2}\right)^{n/2}\mathrm{Tr}\ \exp\left(h_n\sum_{j=1}^{n}\sigma_j + K_n\sum_j\sigma_j\sigma_{j+1}\right). \tag{5.17}$$

この量子古典変換によると，式 (5.11) の非対角要素（量子効果）は量子軸（ST 軸）方向の相互作用（式 (5.17) の指数の肩の第 2 項）で表される[20]．このように，量子ゆらぎが古典的相互作用に変換されることは興味深いことである．次に示すように，一般の高次元量子系でも同様な変換が可能である．

(iii) d 次元量子系と $(d+1)$ 次元古典系の等価性[3~10]

一般の d 次元で書き表すと表記が繁雑になるので，一般性を失うことなく，1 次元横磁場イジングモデル

$$\mathscr{H} = -J\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z - \Gamma\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^x = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}' \tag{5.18}$$

を用いて，量子古典対応を説明する．1 粒子の場合と比較して，対角成分の相

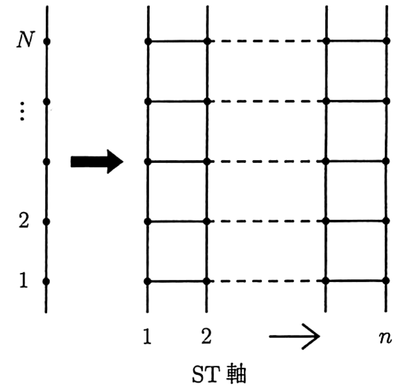


図 5.3　1 次元量子系に等価な 2 次元イジングモデル．

互作用の項がそのまま加わるだけの違いで，数学的取扱いは，0 次元の場合と同じである．すなわち，1 次元横磁場イジングモデルの状態和 Z_{TI} は

$$\begin{aligned} Z_{\mathrm{TI}} &= \mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}} = \lim_{n\to\infty} \mathrm{Tr} \left(\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{n}\mathscr{H}_0}\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{n}\mathscr{H}'}\right)^n \\ &= \lim_{n\to\infty} \left(\frac{1}{2}\sinh\left(\frac{2}{n}\beta\Gamma\right)\right)^{Nn/2} \mathrm{Tr}\ \exp\left(-\beta\mathscr{H}^{(n)}_{\mathrm{Ising}}\right) \end{aligned} \tag{5.19}$$

と 2 次元イジングモデルの状態和に変換される[3]．ただし，$\mathscr{H}^{(n)}_{\mathrm{Ising}}$ は，図 5.3 に示されるような有効相互作用を持つ 2 次元イジングモデルである：

$$-\beta\mathscr{H}^{(n)}_{\mathrm{Ising}} = \frac{\beta J}{n}\sum_{i,j}\sigma_{i,j}\sigma_{i+1,j} + \frac{1}{2}\log\ \coth\left(\frac{\beta}{n}\Gamma\right)\sum_{i,j}\sigma_{i,j}\sigma_{i,j+1}. \tag{5.20}$$

この等価な 2 次元ハミルトニアンをみると，ST 軸方向の有効相互作用は，Γ が大きくなるほど小さくなることがわかる．これは量子効果が強くなるとスピン反転が激しくなり，量子的な“乱れ”（量子ゆらぎ）が強くなって ST 軸方向には相関が弱くなることを示している．逆に，Γ が小さくなると ST 軸方向の相互作用 K_n は $-\frac{1}{2}\log\gamma_n$ に比例して大きくなる．同時に式 (5.19) の最初の因子が零に近づく．したがって，$n\to\infty$ $(\gamma_n\to 0)$ の極限のとり方には工夫が必要になる[21,22]．

また，上の ST 変換を利用すると 2 次元のオンサーガーの厳密解[23]を用いて 1 次元量子スピン系の解が求まることになる[2,3]．もちろん，この 1 次元量子スピン系のモデルは直接対角化して厳密に解くことができる[24]．両方のモデルの解法を比較すると，解法の数理的構造が極めて類似していることに気づいた人は多いであろう．これは，2 次元イジングスピン系の転送行列と 1 次元横磁場イジングモデルのハミルトニアンが，両方の相互作用の間の適当な関係式のもとに両者が可換になり，同時対角化可能となるという興味深い事実からも頷ける[2]．さらに，上に述べた直接的な変換理論からもその妥当性が理解できる．

いずれにしても，異なる 2 つのモデルの等価性は物理系を横断的に扱うのに

大変便利である．

5.5 量子モンテカルロ法の数理

以上の等価性の理論より，量子系に対しても古典系で開発された研究手法が適用できることになることがわかる[3~10]．特に，計算機シミュレーションの典型的な方法としてのモンテカルロ法が量子系で一般的に適用できることになり急激に量子系の計算機実験による研究が発展した[3~10]．

量子系が古典系に等価になるといっても，最初から古典系を記述するために導入されたモデルとは本質的に異なるところもあることに注意しなければならない[3~10]．そうでなければ，量子系と古典系の質の違いが計算機実験では見出せないことになってしまう．古典表示で変換された系の特徴を列挙すると次の通りである：

- もとの量子系の相互作用の対称性が古典系でも形を変え保持されている．例えば，ハイゼンベルグモデルの相互作用

$$-J(\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j) = -J\left(S_i^xS_j^x + S_i^yS_j^y + S_i^zS_j^z\right) \tag{5.21}$$

　はスピン空間で回転対称性（すなわち O(3) 対称性）を持っている．したがって，これを古典表示すると，その対称性を反映した特殊な 4 体力相互作用となる[3]．
- 全スピン保存の系では，それに対応して古典系のスピン変化を上向き（または下向き）のスピンだけに着目して調べることができる（これは「世界線の方法」と呼ばれる）[9,10]．

5.6 おわりに

今回は，量子系を古典系で表示する一般的な方法論を説明し，量子スピン系で具体的にその本質を解説した．この量子古典対応の重要な活用方法として，量子モンテカルロ法の数理を解説した．その解析的な応用例や近似計算の精度を上げる高次分解公式などに関しては次回以降に解説する．

参考文献

1) 鈴木増雄，本連載第 1～4 回，「数理科学」2014 年 6 月号，8 月号，9 月および，11 月号（サイエンス社）．
2) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **46**, 1337 (1971).
3) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 1454 (1976), および鈴木増雄：『統計力学』（現代物理学叢書）（岩波書店，2000）．
4) 大貫義郎，鈴木増雄，柏太郎：『経路積分の方法』（現代物理学叢書）（岩波書店，2012 年 6 月再版）の第 6 章「代数的一般化」参照．
5) M. Suzuki, ed: *Quantum Monte Carlo Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Systems*, Springer-Verlag (1987).
6) B.K. Chakrabarti, A. Dutta and P. Sen: *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Model*, Springer (1996).

7) 鈴木増雄：『活力を与える「物理」』(オーム社，2007)，第 6 章「拡張・変換の視点で限界・困難を乗り越える」参照.
8) M. Suzuki, *Quantum-Classical Statistical Physics Correspondence*: 5th Ramanujan Lecture 2010 (25th November, 2010, Kolkata, India).
9) M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda, *Prog. Theor. Phys.* **58**, 1377 (1977).
10) H. De Raedt and A. Lagendijk, *Phys. Rep.* **127**, 233 (1985); H. De Raedt and K. Michielsen, *Ann. Phys.* **4**, 679 (1995).
11) H.F. Trotter, *Proc. Am. Math. Phys.* **10**, 545 (1959).
12) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **21**, 2274 (1966).
13) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **57**, 193 (1977).
14) M. Suzuki, *Phys. Lett. A* **146**, 319 (1990); ibid. **165**, 387 (1992); *J. Math. Phys.* **32**, 400 (1991); *Physica A* **191**, 501 (1992); ibid. **194**, 432 (1993); ibid. **205**, 65 (1994).
15) E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner, *Geometric Numerical Integration*, Springer (2006), およびその引用文献参照.
16) M. Suzuki, *Phys. Lett.* **18**, 233 (1965).
17) M. Suzuki, *Phys. Lett.* **19**, 267 (1965).
18) M. Suzuki, *Int. J. Mod. Phys. B* **16**, 1749 (2002), およびその引用文献参照.
19) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **37**, 770 (1967).
20) 鈴木増雄,『変分原理と物理学』(丸善出版，近刊)；「パリティ」2012 年 4 月号より 2013 年 5 月号までの連載記事.
21) M. Suzuki and M. Inoue, *Prog. Theor. Phys.* **78**, 787 (1987).
22) M. Inoue and M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **79**, 645 (1988).
23) L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
24) S. Katsura, *Phys. Rev.* **127**, 1508 (1962).

(すずき・ますお，東京大学名誉教授)

経路積分と量子解析 いかにして量子現象を数理的に扱うか

第6回

量子古典対応(2)

量子転送行列法

鈴木 増雄

6.1 はじめに

量子古典対応[1,2]の解析的な応用の重要な例としては，量子転送行列法[3~5]をあげることができる．これは量子系を古典系に変換して，古典系でよく知られている転送行列法をこのST変換された系に適用するというもので，一見平凡な方法に見えるかもしれない．確かに，もとの格子空間（これを実空間と呼ぶ）を転送行列の定義空間とすると，もとの量子系のハミルトニアンが転送行列として現れるだけで，問題は解決されない．ところが後で詳しく述べるように，視点を変えるだけで事態は一変するのである．すなわち，ST軸（量子軸または虚時間軸とも呼ばれる）方向の空間を転送行列の定義空間とすることにより，無限個の固有値を求める代わりに1個の（最大）固有値を求めるだけで，系の自由エネルギーなどの熱力学的な物理量が求まることになる[3]．言うなれば，

「横のものを縦にするだけで新しい道が拓けることもある」

のである．今から約30年前に，このアイデアを東大の研究室で説明しても，なかなかこの方法の有効性を実証してみようという院生が現れず，講義などの合間に独りで研究しているうちに時間が過ぎていったが，やがて新しい院生が興味を持ち始め，明るい見通しがついてきて，今も発展し続けている[4~6]．

6.2 量子転送行列法とその有効性

前回に説明したST変換[1,2]により，d次元量子系を$(d+1)$次元古典系に変換し，その古典系のST軸方向の空間で転送行列$\mathscr{T}_n$を定義する[3]．わかり易くするため，図6.1のように，1次元量子スピン系を2次元イジングスピン系に変換した例[4]で説明する．

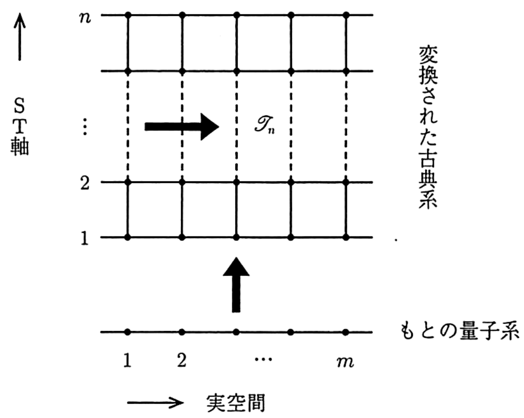


図 6.1　ST 変換された古典系の ST 軸上で定義される量子転送行列.

統計力学において基本的な物理量である状態和 $Z_m(\beta)$ は

$$Z_m(\beta) = \mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}; \quad \beta = \frac{1}{k_\mathrm{B}T} \quad (T \text{ は系の温度}) \tag{6.1}$$

と定義される．ただし，m は系のサイズを表す．

さて，変換された古典系の ST 軸（縦の任意の 1 列）の格子点の情報を右隣に伝える行列として量子転送行列 $\mathscr{T}_n$ が定義される．したがって，左端から右端まで情報を伝える操作は，サイズ m の系では，$\mathscr{T}_n^m$ で表される．系の状態和 (6.1) は，この情報伝達の総和であるから，量子転送行列 $\mathscr{T}_n$ を用いて

$$Z_{m,n}(\beta) = \mathrm{Tr}\ \mathscr{T}_n^m \tag{6.2}$$

の $n \to \infty$ の極限として与えられる．

通常の統計力学の手順では，系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ をまず対角化し，その固有値 $\{E_j\}$ をすべて求め，

$$Z_m(\beta) = \sum_{j=1}^{\mathrm{all}} \mathrm{e}^{-\beta E_j} \tag{6.3}$$

のように，すべての固有値に関する和を求めなければならない．通常は，固有値をすべて求めるのは困難であり，たとえ近似的にでも求まったとしても，それらを式 (6.3) のように指数の肩に乗せて和をとるのも大変である．

これらの事情を踏まえて，式 (6.2) を求める手順について考察する．解析的な手順としては，やはり量子転送行列 $\mathscr{T}_n$ の固有値 $\{\Lambda_j(n)\}$ を求めて

$$Z_{m,n}(\beta) = \sum_{j=1}^{\mathrm{all}} \Lambda_j^m(n) \tag{6.4}$$

のようにすべての固有値 $\{\Lambda_j\}$ に関する和をとることになる．このままでは，横のものを縦にしただけで何のご利益もなさそうに思われるであろう．横のものを縦にもしないものぐさの院生でも一瞬のうちに頭の中でこのくらいのところまでは考える．問題はこの先にある．数学の定義通りの手順では，ST 軸の長さ n をまず ∞ にしてから，熱力学的極限（系のサイズ m を ∞ にする極限）をとることになる．昔，もし，この 2 つの極限を逆にとることが可能だとしたらどうなるであろうかと筆者は考えたところもとの系の相互作用が短距離力のと

きは，この「極限操作交換定理」が，後に示すように，成り立つことがわかった[3]．そこで，この定理に基づいて，まず，熱力学的極限を先にとることにする．状態和 $Z_{m,n}(\beta)$ 自体は ∞ になってしまうので，統計力学では，自由エネルギー（漸近的に格子点の総数 m^d に比例する量—示量的な量）

$$F_m = -k_{\rm B}T\log Z_m(\beta) \tag{6.5}$$

に対応して，粒子 1 個当りの自由エネルギー（の $-\beta$ 倍）

$$f_{m,n} = \frac{1}{m^d}\log Z_{m,n}(\beta) \tag{6.6}$$

を扱う．その $m\to\infty$ の極限は，図 6.1 の例 $(d=1)$ では

$$\begin{aligned} f_n &= \lim_{m\to\infty}\frac{1}{m}\log\left\{\Lambda_{\max}^m(n)\left(1+\sum_{j\neq\max}\left(\frac{\Lambda_j(n)}{\Lambda_{\max}(n)}\right)^m\right)\right\} \\ &= \lim_{m\to\infty}\frac{1}{m}\log\Lambda_{\max}^m(n) = \log\Lambda_{\max}(n) \end{aligned} \tag{6.7}$$

となり，何と最大固有値 $\Lambda_{\max}(n)$ 1 個で自由エネルギーが与えられることになる．これは，式 (6.3) のように無限個の固有値を用いた定式化と比べて大変優れている．量子転送行列の最大固有値を与える状態は，通常は基底状態に対応するので，1 次元量子スピン系の $\Lambda_{\max}(n)$ はベーテ仮設法[7]によって求めることができる．実際，クリュンパー[6]（A. Klümper）は，この量子転送行列法の定式化を用いて $\Lambda_{\max}(\infty)$ に関する閉じた積分方程式を求めることに成功した．ただし，本稿では，その方程式は複雑なので省略する．

6.3 極限操作交換定理[3]

前節で説明した量子転送行列が有効に活用できるのは，次の定理のお陰である．

定理 6.1（極限操作交換定理[3]） 次の 3 つの極限を考える：

$$\lim_{m\to\infty}\lim_{n\to\infty} f_{m,n} = f,\quad \lim_{n\to\infty}\lim_{m\to\infty} f_{m,n} = \tilde{f} \tag{6.8}$$

および，2 重極限

$$\lim_{\substack{m\to\infty \\ n\to\infty}} f_{m,n} = \hat{f}. \tag{6.9}$$

系の相互作用が短距離力であれば，上の 3 つの極限 $f,\ \tilde{f},\ \hat{f}$ はそれぞれ存在し，互いに一致する：

$$f = \tilde{f} = \hat{f}. \tag{6.10}$$

証明[3]　証明の本質は，一般の d 次元でも，また短距離力であれば少し広がりのある力でも同じであるから，ここでは $d=1$ とし，最近接相互作用の場合についてのみ証明していく[3]．次のように証明を 3 つのステップに分けて考える[3]．

<u>ステップ 1</u>：まず，$f_{m,n}$ の $m\to\infty$ に関する一様収束性を証明する．図 6.2 のように，サイズ $m'=2m$ の系を 2 つに分離し，その間の相互作用の大きさを J とする．

熱力学的極限の存在を証明するとき[8]と同様に，今の問題では ST 変換された

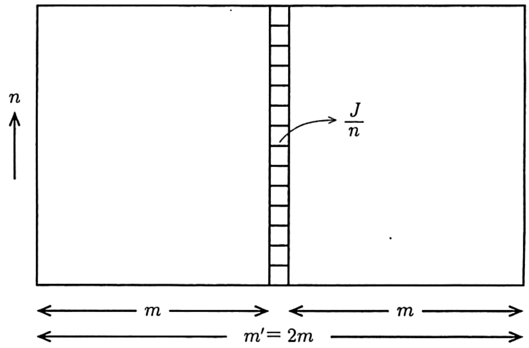


図 6.2　ST 変換された古典系におけるサイズが異なる場合に対する規格化された自由エネルギー（の $-\beta$ 倍）$f_{m,n}$ と $f_{m',n}$ との間の不等式を探す[3]．

古典系の相互作用が実空間方向は $\frac{J}{n}$ になるだけであるから，次の不等式が成り立つことが容易にわかる：

$$|f_{m',n} - f_{m,n}| \le \frac{1}{m'}\frac{|J|}{n}n = \frac{|J|}{m'} = \frac{|J|}{2m}. \tag{6.11}$$

この不等式を p 回繰り返し用いると，サイズ $m'' = 2^p m$ とサイズ m との間の自由エネルギーの間には次の不等式が導ける．すなわち，任意の正の整数 m, n および p に対して次式が成り立つ：

$$\begin{aligned} &|f_{m'',n} - f_{m,n}| \\ &\le |f_{2^p m,n} - f_{2^{p-1}m,n}| + |f_{2^{p-1}m,n} - f_{2^{p-2}m,n}| + \cdots + |f_{2m} - f_m| \\ &\le \frac{|J|}{m}\left(\frac{1}{2^p} + \frac{1}{2^{p-1}} + \cdots + \frac{1}{2}\right) \le \frac{|J|}{m}. \end{aligned} \tag{6.12}$$

こうして，n によらず，$N_1 = \frac{|J|}{\varepsilon}$（$\varepsilon$ は任意の正実数）より大きい任意の m, m' に対して次の不等式が成り立つことがわかった：

$$|f_{m,n} - f_{m',n}| < \varepsilon. \tag{6.13}$$

ゆえに，次の一様収束性が示せた：

$$\lim_{m\to\infty} f_{m,n} = \tilde{f}_n \quad (\text{一様}). \tag{6.14}$$

<u>ステップ 2</u>：一方，極限 $n \to \infty$ を先にとると，トロッター公式の収束性に関する不等式[3]を用いて容易に，次式で定義される f_m が存在する：

$$\lim_{n\to\infty} f_{m,n} \equiv f_m. \tag{6.15}$$

しかも，この $m \to \infty$ の極限 f の存在は通常の熱力学的極限の存在の証明により[10]保証されている：

$$\lim_{m\to\infty} f_m = f. \tag{6.16}$$

そこで，次に式 (6.14) の右辺 $\tilde{f}_n$ の $\tilde{f}$ への収束および等式 $\tilde{f} = f$ の証明を行う．まず次の補題を紹介する．

補題 6.1　次の 2 つの極限

$$\lim_{n\to\infty} a_{m,n} = \alpha_m \ (\text{すべての}\ m\ \text{に対して}),\ \text{および}\ \lim_{m\to\infty} \alpha_m = \alpha \tag{6.17}$$

が存在して，かつ次の極限

$$\lim_{m\to\infty} a_{m,n} = \beta_n \tag{6.18}$$

が一様収束ならば（n によらず一様に収束するならば），$\{\beta_n\}$ の極限が存在して，それは α に等しい：

$$\lim_{n\to\infty} \beta_n = \alpha. \tag{6.19}$$

これを用いると，$\tilde{f}_n$ は $n \to \infty$ で $\tilde{f}$ に収束し，等式 $\tilde{f} = f$ が成り立つことが証明される．

さて，蛇足ではあるが，ついでにこの補題の証明も簡単なので書いておくことにする．式 (6.17) より，m を固定しておくと，任意の正の ε と整数 $n > N_1$ に対して

$$|a_{m,n} - \alpha_m| < \frac{\varepsilon}{3} \tag{6.20}$$

が成り立つ．また，式 (6.17) の第 2 式より，任意の整数 $m > N_2$ に対して

$$|\alpha_m - \alpha| < \frac{\varepsilon}{3} \tag{6.21}$$

が成り立つ．同様に $m > N_3$ に対して

$$|a_{m,n} - \beta_n| < \frac{\varepsilon}{3} \tag{6.22}$$

が成り立つ．したがって，任意の $n > N_1$ と任意の $m > \max(N_2, N_3)$ に対して

$$|\beta_n - \alpha| < |\beta_n - a_{m,n}| + |a_{m,n} - \alpha_m| + |\alpha_m - \alpha| < \varepsilon \tag{6.23}$$

となり，補題が示せた．

ステップ 3：不等式 (6.23) で，$a_{m,n} = f_{m,n}$, $\beta_n = \tilde{f}_n$, $\alpha = f = \tilde{f}$ とおくと，任意の $m, n > N$ に対して不等式

$$|f_{m,n} - \tilde{f}| \le |f_{m,n} - \tilde{f}_n| + |\tilde{f}_n - \tilde{f}| < \frac{\varepsilon}{3} + \varepsilon < \frac{4}{3}\varepsilon \tag{6.24}$$

が成り立つから，2 重極限 $\hat{f}$ が存在し，次の重要な等式

$$\hat{f} = \tilde{f} = f \tag{6.25}$$

が証明できた．

この等式の証明を詳しく説明したのは，証明自体に ST 変換の特徴がよく反映されていると同時に，それは量子転送行列の有効性を保証する重要な基礎となる定理を与えるからである[3]．

ついでながら，最大固有値の次の固有値 $\Lambda_{\rm next}$ が求まると，実空間方向のスピン相関関数 $C(R) \equiv \langle \sigma_i^z \sigma_{i+k}^z \rangle$ および相関距離 ξ が次の公式によって与えられる[4]：

$$C(R) \sim \frac{\exp(-\frac{R}{\xi})}{R^{d-2+\eta}} \quad \text{および} \quad \frac{1}{\xi} = -\lim_{n\to\infty} \log\left|\frac{\Lambda_{\rm next}}{\Lambda_{\max}}\right|. \tag{6.26}$$

したがって，臨界点や 1 次元基底状態などでは，$\Lambda_{\rm next}$ が $\Lambda_{\max}$ と一致し，$\xi \to \infty$ となり，相関関数は巾則にしたがう：

$$C(R) \sim \frac{1}{R^{d-2+\eta}}. \tag{6.27}$$

平均場近似の理論であるオルンシュタイン・ゼルニケ理論からのずれを表す臨

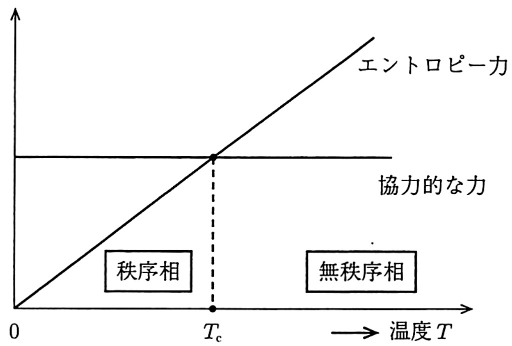


図 6.3　温度によらない協力的な力（相互作用）と（温度と共に大きくなる）エントロピー力が釣り合ったところ T_c で相転移が起こる．

界指数として η がフィッシャーによって導入された．上の ξ の公式を用いて，1 次元スピン系の相関関数が多くの人によって研究されている[4~6]．

6.4 古典転送行列から量子転送行列への発展史

熱平衡状態での相転移現象などの一般的な協力現象[11]を扱う際には，協力的な力とその効果を乱す熱的なゆらぎ（エントロピー効果，筆者が 1978 年ブラッセルで開催されたソルベイ会議の講演であえて「エントロピー力」と呼んで以来，プリゴジンら多くの人が，本当は力ではないのに，この名称を使うようになった）の絡み合いが重要である．これら両者の釣り合ったところで図 6.3 のように相転移が起こる[11]．

秩序相では，いったんどこかでたまたま局所的に秩序（order）ができると，他のところにもこの効果が伝わっていく．ゼルニケは，この現象を

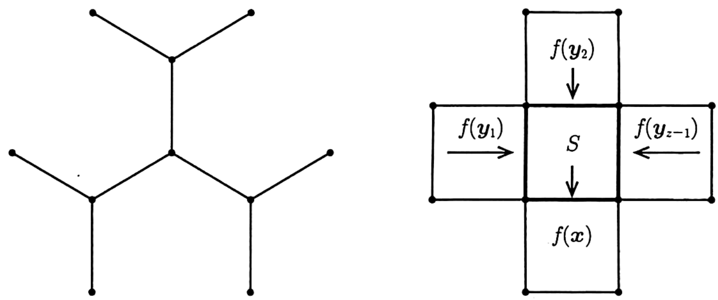
"propagation of order"（秩序の伝ぱん）

として捉えて，相関関数を導入して理論的に議論した．これらは転送行列の方法の萌芽となったと考えられる．ゆらぎも含めた秩序状態が 1 つの列（面）から次の列（面）へと伝ぱんする状況を表す演算子が，とりも直さず，転送行列である[9~11]．この意味で，転送行列のアイデア[9,10]は統計力学の問題を情報理論と関連づけて扱う最近の潮流[13]の草分けと言ってもよいかもしれない．

量子転送行列のアイデア[3~5]は，この古典系の統計力学の情報的取扱いである転送行列の概念を量子系に拡張したものと位置づけることができる．これからの発展・応用が期待される．

6.5 転送行列法と有効場理論—合流型転送行列の導入

すでに述べた通り，転送行列は統計力学の解析的方法として極めて強力な武器である．この方法が量子系にまで拡張され，量子転送行列として発展しつつある現在，この転送行列法と有効場理論[14]やくり込み群[15]との関係[16~18]にここでふれておくことも有益であろう．これらはまた，相関等式[19,20]とも深く関係



(a) ケーリートリー（ベーテ格子，$z=3$）　(b) クラスターケーリートリー（$z=4$）

図 6.4　クラスターケーリートリーと合流型転送行列[17]．

している．

要するに，有効場理論[14,16]では，着目する以外のスピンや粒子以外の自由度については先に消去してその効果を有効的に着目する自由度に有効場として働きかける．くり込み群の理論[15]では，有効場を少しずつ漸化的に取り込む．転送行列では，厳密に有効場を構成していく．したがって，1 次元イジング模型のように厳密に解ける系では，上記 3 つの方法はどれも厳密に実行することができ，厳密に解くことが可能となる．すなわち，これら 3 つの方法は，少なくとも 1 次元系では等価である[18]．それは，1 次元系では，情報の伝わり方が極めて単純だからである．転送行列法でも有効場理論でもくり込み操作でも全く共通のことをやっていることになる．

今までの転送行列法では，情報の取扱いが線形である．これらを非線形に拡張したものが筆者の提唱した合流型転送行列 (confluent transfer matrix) である[17]．図 6.4 のように，通常のケーリートリーの各格子点を研究対象とする格子のクラスターに置き換え，着目するクラスター S に接続する辺（または面）$1 \sim (z-1)$ までの状態 $\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_{z-1}$ に対応する分布関数 $f(\boldsymbol{y}_1), f(\boldsymbol{y}_2), \cdots, f(\boldsymbol{y}_{z-1})$ を考える．残りの辺（または面）の分布関数 $f(\boldsymbol{x})$ は，クラスター S の境界条件 $\{f(\boldsymbol{y}_j)\}$ が与えられたとき，S 面のゆらぎがカノニカル分布（またはボルツマン分布）しているとして，クラスター S に対応する合流型転送行列 $\mathscr{T}$ を用いて

$$f(\boldsymbol{x}) = \mathrm{Tr}_{\{\boldsymbol{y}_j\}} S(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_{z-1}) f(\boldsymbol{y}_1) \cdots f(\boldsymbol{y}_{z-1}) \equiv \mathscr{T} f(\boldsymbol{y}_1) \cdots f(\boldsymbol{y}_{z-1})$$

の形に与えられる[17]．この非線形方程式を解くことにより，固有関数 $f(\boldsymbol{x})$ を求めれば，クラスター S に対応するもとの系での，状態 $\boldsymbol{x}$ で指定される任意の物理量 $Q(\boldsymbol{x})$ のカノニカル平均は

$$\langle Q(\boldsymbol{x}) \rangle = \frac{\mathrm{Tr}\ Q(\boldsymbol{x}) f^2(\boldsymbol{x}) D(\boldsymbol{x})}{\mathrm{Tr}\ f^2(\boldsymbol{x}) D(\boldsymbol{x})} \tag{6.28}$$

で与えられる[17]．ただし，$D(\boldsymbol{x})$ は状態 $\boldsymbol{x}$ に対するボルツマン因子を表す．

この合流型転送行列の特徴は，その非線形性のために，有限のクラスター S に対しても，ベーテ近似のように相転移が一般に起こる．しかも，クラスター S のサイズを大きくするにつれて，系のゆらぎの効果がますます正しく取り入れられるようになり，相転移点 T_c も正しい相転移点 T_c^* に近づく．この系統的

な平均場近似列に CAM 理論[16]を適用することにより，非常に精度の高い非古典的な臨界指数が得られる[21]．

この理論で $z=2$ とおくと通常の転送行列になる．こうして，厳密に解ける（本質的に）1 次元的な系では，転送行列法と有効場理論が合流型転送行列の理論を通して等価であることが理解される．また，合流型転送行列の作り方からわかる通り，実空間くり込み操作とも対応していることがわかる．

6.6 おわりに

次回からは，手順の分離と統合について，指数積分解公式の一般論を中心に詳しく解説したい．

参考文献

1) 鈴木増雄，本連載第 5 回，「数理科学」2014 年 12 月号．
2) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56** 1454 (1976), および S. Suzuki, J. Inoue and B.K. Chakrabarti, *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models* (Springer, 2013).
3) M. Suzuki, *Phys. Rev. B***31** 2957 (1985), および M. Suzuki, *Physica A***321**, 334 (2003).
4) M. Suzuki and M. Inoue, *Prog. Theor. Phys.* **78**, 787 (1987), および M. Inoue and M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **79**, 645 (1988).
5) A. Sugiyama, H. Suzuki and M. Suzuki, *Physica A***353**, 271 (2005).
6) A. Klümper, *Z. Phys. B***91**, 507 (1993).
7) H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
8) R.B. Griffiths, in *Phase Transition and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and M.S. Green (Academic Press, New York, 1972).
9) H.A. Kramers and G.H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252 (1941).
10) 久保亮五，物性論研究 **1**, 1 (1943), および本人による英訳 in Selected Papers of Professor Ryogo Kubo (Syokabo, Tokyo, 1980) edited by M. Suzuki *et al.* この論文は第 2 次戦時中に書かれたものであり，文献 9) とは全く独立に発想されたものである．論文のタイトルも「統計力学における一つの解析的方法」という魅力的なものであって，1 次元イジング模型は 2 行 2 列の行列の対角化で厳密に解けて相転移が有限温度では起こらないことが示されている．2 次元では固有値の縮退が起こり得ると予想し，有限温度での相転移のメカニズムを説明している．1944 年の有名なオンサーガーの厳密解にもう一歩というところまで近づいた記念すべき論文である．日本語の論文のため，外国ではあまり知られていないのは残念である．
11) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，2000 年）．
12) F. Zernike, *Physica* **7**, 565 (1940).
13) H. Nishimori, *Statistical Physics of Spin Glasses and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000) および西森秀稔，『スピングラス理論と情報統計力学』（岩波書店，1999 年）．
14) H.A. Bethe, *Proc. R. Soc. London A***150**, 552 (1935).
15) K.G. Wilson, *Phys. Rev. B***4**, 3174, 3184 (1971).
16) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **55**, 4205 (1986), ibid. **57**, 2310 (1988).
17) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **58**, 3642 (1989).
18) 高安亮子，東京理科大学理学研究科物理学専攻修士論文 1204630（指導教員：鈴木増雄）．
19) M. Suzuki, *Phys. Lett.* **19**, 267 (1965).
20) M. Suzuki, *Int. J. Mod. Phys. B***16**, 1749 (2002).
21) M. Suzuki, M. Katori and X. Hu, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 3092 (1987)
22) M. Suzuki and X. Hu, M. Katori, A. Lipouski, N. Hatano, K. Minami and Y. Nonomura, *Coherent Anomaly Method—Mean Field, Fluctuations and Systematics* (World Scientific, Singapore, 1995).

（すずき・ますお，東京大学名誉教授）

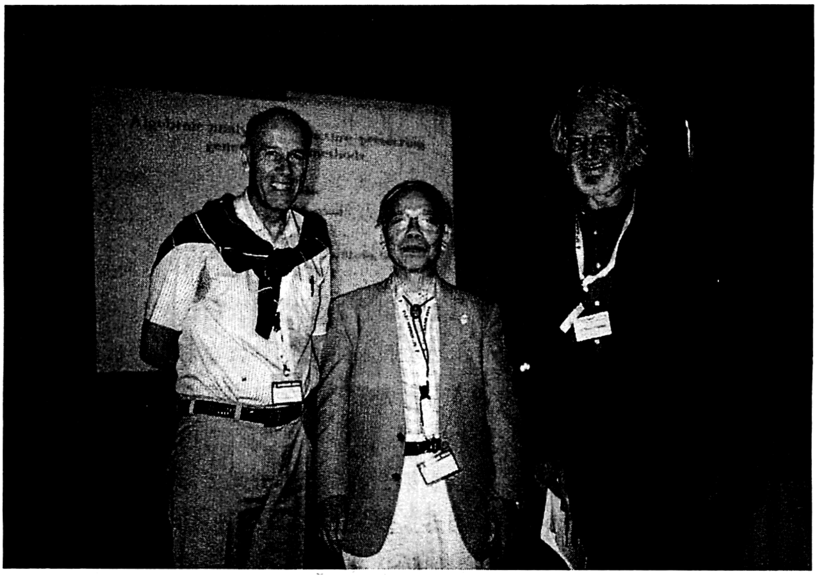


写真 7.1　文献 4) の著者のうちの E. Hairer 教授（左），G. Wanner 教授（右）と．

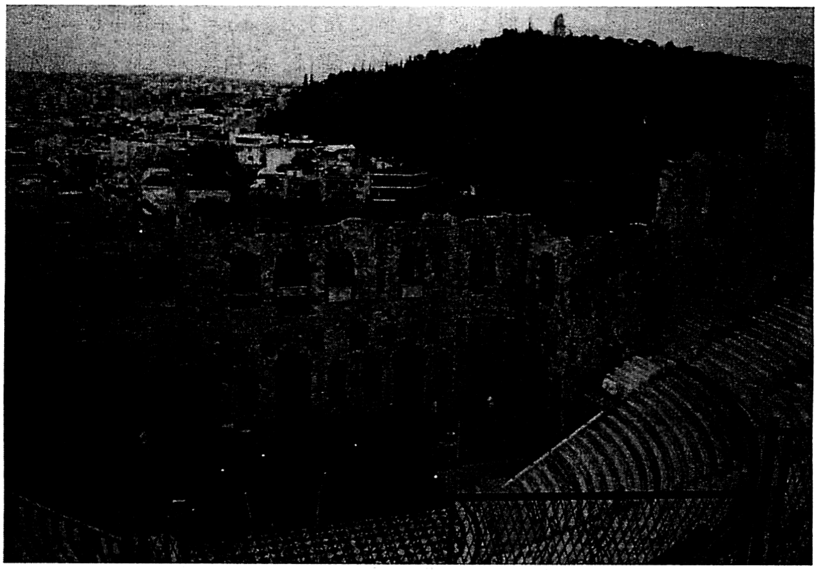


写真 7.2　アテネのアクロポリスの丘からの眺め．手前は古代劇場（筆者撮影）．

んで解き方を知ると，それだけ自分で考える楽しみが減ってしまうからである．

最初に図 7.1 のような 3×3 の魔方陣の解き方を考える．

まず，1 から 9 までの自然数を奇数 1, 3, 5, 7, 9 のグループと偶数 2, 4, 6, 8 のグループに分ける．各列の和は $(1+2+\cdots+9)/3 = 15$ であることがわかり，これは奇数であるから，図 7.1 (a) のように，各列に△は奇数個（1 個または 3 個）配列することになる．これが，この問題の最初の手順の分離である．すなわち，図 7.1 (b) のように十字の 5 つの枡目に 1, 3, 5, 7, 9 の 5 個の奇数を配列して，縦と横の列の和がそれぞれ 15 になるようにする問題をまず考える．これは簡単に解ける．すなわち，15 を 3 つの異なる奇数の和で表すと，$15 = 7+5+3 = 9+5+1$ という 2 種類に限られることがわかる．この分解で

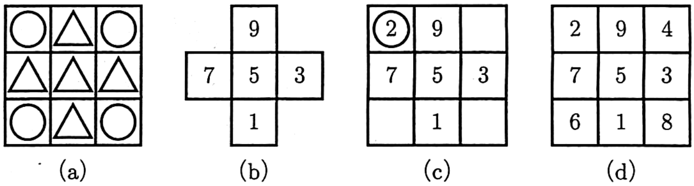


図 7.1　3 × 3 の魔方陣．(a) 奇数 1, 3, 5, 7, 9 を△印で表し，偶数 2, 4, 6, 8 を○印で表す．(b) 奇数の配置．(c) まず，2 の位置が決まる．(d) 最終図．

は奇数 5 は 2 回現れるので図 7.1 (b) の中央の数が 5 となる．図形を 90° 回転して重なるものや反転して同じになるものは同一の魔方陣とみると，奇数 9 はどこにおいてもよいことになり，図 7.1 (b) のように上の枡目に 9 を配置しても一般性を失わない．こうして，図 7.1 (b) のような配列が解となることが容易にわかる．これが第 2 の手順の分離である．よって，5 個の奇数の配列は図 7.1 (b) のようになる．偶数 2, 4, 6, 8 を残りの桝目にはめ込むのは容易である．まず，一番小さい偶数 2 は，2 つの大きな奇数 7 と 9 の隣の角に来る（図 7.1 (c)）．その後は，芋蔓式に決まり，図 7.1 (d) の魔方陣となる（または，15 を 2 を含む偶数 2 個と奇数 1 個で表すと，$15 = 2 + 7 + 6 = 2 + 9 + 4 = 2 + 5 + 8$ となることを用いてもよい）．実は，未知数 $x_1, \cdots, x_9$ を左上から順に割り当て，条件式を作ると，連立方程式の数が 8 個となり，不定方程式となってしまい，そのままでは解けない．中央の数が対称性から考えて 5 であるとすると連立方程式の数が 8 個となり，未知数の数と一致する．しかし，8 個の方程式は互いに独立ではない（係数行列の行列式が零になる）ため，まだ不定である．このように，魔方陣を代数的に解くのは面倒である．魔方陣の問題は，うまい工夫をすることによって解けるところに，古来から多くの人々[3)]をとりこにしてきた魅力がある．

物理の研究でも，同様の戦略でうまくいくことがある．理論の場合には実験設備も必要ないので，あまり時間をかけて先行研究があるかどうか調べて労力を費やさず，まず自分のアイデアを育て発展させて結果を出してみるのもよい．それから同じ研究があるかどうか調べるのも一つの有効な方法である．私はこの方法を好んで用いている．たとえ，先行研究に似たようなものがあっても自分の研究成果と全く同じということは少ないものである．

こうして研究を進め，新しいところのみ論文にすればよい．これでは一見研究の無駄が多いように思われるかもしれないが，そもそも研究には無駄やリスクは付きものである．

さて，よりサイズの大きい魔方陣になるとますます解き方は複雑になる．サイズが奇数の場合には，上に用いた方法が容易に拡張できる（奇数・偶数分離魔方陣[3)]）．

さらに，特殊な $3^n \times 3^n$ $(n = 1, 2, 3, \cdots)$ の魔方陣は 3×3 の魔方陣と類似の法則が存在して興味深い[3)]．

実は，後で詳しく解説する高次の指数積公式[5~11)]を漸化式の方法で一般的に無限次まで構成する筆者の理論[5~7)]と上の魔方陣の構成法とは考え方に関して類似していることを強調しておきたい．

7.3 フォッカー・プランク方程式のリー代数的解法と手順の分離

ここでは，物理現象を例にして「手順の分離」の考え方を説明しよう．通常の力学で扱うニュートンの法則には時間の 2 階微分しか現れないので，基礎方程式は時間反転に対して対称的である．しかし，現実の体系は速度（時間の 1 階微分）に比例する摩擦抵抗などを受けるので，体系を記述する基礎方程式は（以前に変分原理の解説でふれたように），時間反転対称性を破る項を含む．このような系では，不可逆的な現象が起こる．ブラウン粒子の速度のような着目する変数を x として，それが 1 次元的に拡散する現象は，時刻 t で変数 x をとる確率分布 $P(x,t)$ に対するフォッカー・プランク方程式

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\gamma \frac{\partial}{\partial x}(xP) + \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x^2} P \tag{7.1}$$

で記述される．ただし，上式の右辺第 1 項はドリフト項と呼ばれ，変数 x の時間変化が $-\gamma x$ に比例してドリフトする効果を表す．第 2 項は拡散定数を ε とする拡散効果を表す．式 (7.1) は形式的には，2 つの微分演算子

$$A = -\gamma \frac{\partial}{\partial x} x,\ \text{および}\ B = \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{7.2}$$

を用いて

$$\frac{\partial P}{\partial t} = (A+B)P \tag{7.3}$$

と書ける．この方程式の形式的な解は，指数演算子を用いると

$$P(x,t) = \mathrm{e}^{t(A+B)} P(x,0) = \mathrm{e}^{tA+tB} P_0(x) \tag{7.4}$$

と表される．すなわち，初期分布 $P_0(x)\ (= P(x,0))$ がわかれば，原理的に任意の時刻の分布関数 $P(x,t)$ が求まることになる．問題は，この指数演算子をいかに取り扱うかである．2 つの演算子は互いに可換でない（非可逆である）ため，2 つの積 $\mathrm{e}^{tA}\mathrm{e}^{tB}$ に分けることができない．仮に 2 つの指数積に分解できるとすれば，事は簡単である．なぜならば，指数演算子 e^{tA} と e^{tB} の効果はそれぞれ次の公式

$$\exp\left(-\gamma(t)\frac{\partial}{\partial x} x\right) P(x) = \mathrm{e}^{-\gamma(t)} P\left(x\mathrm{e}^{-\gamma(t)}\right) \tag{7.5}$$

および

$$\exp\left(\varepsilon(t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) P(x) = \{4\pi\varepsilon(t)\}^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(x-y)^2}{4\varepsilon(t)}\right] P(y)dy \tag{7.6}$$

を用いて容易に処理できるからである[12]．すなわち，A の効果は，式 (7.5) からわかる通り，初期分布を変数変換するだけで表される．例えば，$t=0$ で $x=x_0$ とすると，$P_0(x) = \delta(x-x_0)$ となり，A による $P_0(x)$ の時間変化は

$$\mathrm{e}^{tA} P_0(x) = \mathrm{e}^{-\gamma(t)} P_0\left(x\mathrm{e}^{-\gamma(t)}\right) = \mathrm{e}^{-\gamma(t)} \delta\left(x\mathrm{e}^{-\gamma(t)} - x_0\right) = \delta\left(x - x_0\mathrm{e}^{\gamma(t)}\right) \tag{7.7}$$

と与えられる．ただし，$\delta(x)$ はデルタ関数である．時刻 t で $x = x_0 e^{\gamma(t)}$ にドリフトするだけである．分布の形は本質的に変わらない．次に B の効果は，式 (7.6) からわかる通り，幅 $\varepsilon(t)$ で分布が広がっていく拡散現象を与える．

実は大変興味深い関係が A と B の間に存在する[12]．それは，A と B の変換関係が次のように B だけで表されるということである：

$$[A, B] = \alpha B; \quad \alpha = 2\gamma. \tag{7.8}$$

すなわち，$\{A, B\}$ は 2 次元リー代数を構成している．この事実に着目し，後で述べる量子解析を用いると，指数演算子 $e^{t(A+B)}$ は次のように簡単な指数積に分解できる[12]：条件式 (7.8) の下に，任意の λ に対して

$$e^{t(A+B)} = e^{\lambda\nu(\alpha)tB} e^{tA} e^{(1-\lambda)\nu(-\alpha)tB}; \quad \nu(\alpha) = \frac{e^{\alpha} - 1}{\alpha} \tag{7.9}$$

の公式が成り立つ．そこで，$\lambda = 0$ の場合の公式 (7.9) を用いると，式 (7.4) は次のようにあらわに積分形で表される：

$$P(x,t) = \exp\left(-\gamma t \frac{\partial}{\partial x} x\right) \exp\left[\left(1 - e^{-2\gamma t}\right)\left(\frac{\varepsilon}{2\gamma}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] P(x,0)$$

$$= \left\{\frac{2\pi\varepsilon\left(e^{2\gamma t} - 1\right)}{\gamma}\right\}^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(y - e^{-\gamma t}x)^2}{2\varepsilon\left(1 - e^{-2\gamma t}\right)/\gamma}\right] P(y,0)dy. \tag{7.10}$$

要するに，拡散とドリフトの効果を分離して扱うことができることになる．その代わり，2 つの絡み合いの効果は，式 (7.10) で示されているように，拡散定数が有効的に時間に依存することに反映されている．すなわち，最初はランダムな力（ノイズ）によって体系のゆらぎが大きくなり（拡散し），それらがさらに方向性のある平均的な力（ドリフトの効果）によって発展していき，くり込まれた非線形の（指数関数 $\exp(2\gamma t)$ の）有効的時間によって上記 2 つの効果が統合される．これは，“手順の分離と統合” の興味深い例の一つである．この戦略は，ドリフト項が非線形の場合にも漸近的に有効であり，秩序形成の “スケーリング理論” として多くの問題に応用されている[13~15]．

ところで，この節の例（交換関係が式 (7.8) のように閉じている演算子の集まり）のように，リー代数をみたす演算子に対しては，指数演算子の指数積分解が厳密にできるが，一般の演算子に対しては，次節で示すように近似的な指数積分解を扱うことになる．

7.4 指数演算子の高次分解とその実用的意義

前節の例からもわかる通り，互いに非可換な演算子 A と B に対して e^{xA} と e^{xB} がそれぞれ解析的に扱える場合には，指数演算子 $e^{x(A+B)}$ を e^{xA} と e^{xB} の巾積

$$e^{x(A+B)} = e^{t_1 xA} e^{t_2 xB} e^{t_3 xA} e^{t_4 xB} \cdots e^{t_M xB} + O(x^{m+1})$$

$$\equiv f_m(xA, xB) + O(x^{m+1}) \tag{7.11}$$

の形に近似的に分解すると，大変便利なことが多い[5~12]．ここで，上式の右辺が x の m 次まで左辺と一致するようにパラメータ $\{t_j\}$ を決める．こうして求めた右辺の指数積を $f_m(xA, xB)$ と書き，m 次指数積と呼ぶ．容易に $m = 1, 2$ に対しては，

$$f_1(xA, xB) = \mathrm{e}^{xA}\mathrm{e}^{xB}\left(\text{または } \mathrm{e}^{xB}\mathrm{e}^{xA}\right), \tag{7.12}$$

および

$$f_2(xA, xB) = \mathrm{e}^{\frac{x}{2}A}\mathrm{e}^{xB}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A}\left(\text{または } \mathrm{e}^{\frac{x}{2}B}\mathrm{e}^{xA}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}B}\right) \equiv S_2(x) \tag{7.13}$$

であることがわかる．

しかし，$m \geq 3$ になると，見掛けによらず，大変面倒な問題となる[5~12]．特に，初等的に式 (7.11) の両辺の指数演算子をそれぞれ，A と B の非可換性に配慮しながら m 次まで展開し，各項を整理し，両辺が演算子として m 次まで互いに一致する条件式を求めると，パラメータ $\{t_j\}$ に関する非線形の連立方程式が多数出てくる．パラメータ $\{t_j\}$ の数 M が小さいと連立方程式の数のほうが多くなり，解がない．すでに多くの人がこの問題に苦労した末に $m = 3, 4$ などに対しては特殊な解を見つけている[4]．筆者は，$m = 4$ の場合を詳しく調べているうちに，それまでの他の研究とは全く異なる系統的な分解公式の構成法を発見し，任意の次数まで，パラメータ $\{t_j\}$ を解析的に与える一般論を作ることに初めて成功した[5~7]．それが次に説明する漸化式の方法である．

その漸化式の方法による高次分解の話に入る前に，m 次の分解公式 $f_m(xA, xB)$ がわかると，実際の科学・技術の分野の研究でどのようなご利益があるのかにふれておきたい．変数 x が小さくない場合にはどうするか工夫が必要である．それはトロッター公式

$$\mathrm{e}^{x(A+B)} = \lim_{n\to\infty}\left(\mathrm{e}^{\frac{x}{n}A}\mathrm{e}^{\frac{x}{n}B}\right)^n = \left(\mathrm{e}^{\frac{x}{n}A}\mathrm{e}^{\frac{x}{n}B}\right)^n + \mathrm{O}\left(\frac{x^2}{n}\right) \tag{7.14}$$

にならって調べてみると容易に

$$\mathrm{e}^{x(A+B)} = \left(\mathrm{e}^{\frac{x}{n}(A+B)}\right)^n = \left(f_m\left(\frac{xA}{n}, \frac{xB}{n}\right)\right)^n + \mathrm{O}\left(\frac{x^{m+1}}{n^m}\right) \tag{7.15}$$

となることがわかる[4~12]．したがって，変数 x が 1 より大きくても，トロッター数 n を充分大きくすれば，また，分解公式の次数 m を大きくすれば，いくらでも近似の精度を上げることができる．勿論，高次分解公式の次数が高くなるほど，計算のアルゴリズムが複雑になるので計算精度との兼ね合いが肝要となる．通常，4 次の分解公式，特に，筆者の発見した安定性のよい標準分解公式 $S_4^*(xA, xB)$ がよく利用されている（多くの数値計算のプログラムに実装されている）．

このように，もとの指数演算子 $\exp[x(A+B)]$ を A だけの指数演算子と B だけの指数演算子をくり返し掛け合わせることによって精度よく近似することは，前に述べた "手順の分離と統合" の典型的な例になっている．ただし，A と

B はそれぞれ単独には簡単な解析的処理のできる演算子を表すものとする．最近の科学・技術の研究では，実際に実験する前に計算機実験をすることが多く，そのときに，上に説明した公式が大変役に立つ．単純な計算のくり返しを多数回行うのは超高速計算機の最も得意とするところである．式 (7.11) と式 (7.15) の組合せによるアルゴリズムは，様々な科学・技術のシミュレーションの分野で最近よく用いられている．

そこで，次の節では，安定性の良い分解公式を体系的に構成する一般的な方法を解説する．

7.5 漸化式の方法による高次分解[5~12)]

一般に，q 個の任意の演算子 $\{A_j\}$ に対して，式 (7.11) の形の $(m-1)$ 次の指数積 $Q_{m-1}(x)$ が求まったとする：

$$\mathrm{e}^{x(A_1+\cdots+A_q)} = Q_{m-1}(x) + \mathrm{O}(x^m). \tag{7.16}$$

このとき，m 次の近似式は，r を適当にとって

$$Q_m(x) = \prod_{j=1}^{r} Q_{m-1}(p_{m,j}x) \tag{7.17}$$

で与えられる．ただし，パラメータ $\{p_{m,j}\}$ は条件式

$$\sum_{j=1}^{r} p_{m,j}^m = 0, \quad \text{および} \quad \sum_{j=1}^{r} p_{m,j} = 1 \tag{7.18}$$

で決まる[5,6)]．その理由は，式 (7.17) の右辺の積を式 (7.16) を用いて計算してみると，式 (7.18) の第 2 式の条件より，$(m-1)$ 次まで正しいことは直ちにわかる．次に m 次の補正項が式 (7.18) の第 1 式の左辺に比例することに着目すればよい．

ここで新たな困難が現れる．式 (7.18) は m が奇数のときは，実数解が存在するが，m が偶数のときは解は複素数となる．これでは実用上不便である．幸いにして，次の条件 $p_{m,j} = p_{m,M-j+1}$ をみたす対称解 $S_m(x)$ を用いると，奇数解 $S_{2m-1}(x)$ は自動的に $2m$ 次まで正しいことがわかる：

$$S_{2m-1}(x) = S_{2m}(x); \quad S_{2m}(x)S_{2m}(-x) = 1. \tag{7.19}$$

この事実を用いると，条件式 (7.18) は

$$\sum_{j=1}^{r} p_{2m-1,j}^{2m-1} = 0, \quad \text{および} \quad \sum_{j=1}^{r} p_{2m-1,j} = 1 \tag{7.20}$$

に置き換えることができ，常に実数解 $\{p_{2m-1,j}\}$ が存在する．一番簡単には，$r=3$ として，

$$S_{2m-1}(x) = S_{2m}(x)$$

$$= S_{2m-3}(k_m x)S_{2m-3}((1-2k_m)x)S_{2m-3}(k_m x)$$
$$= S_{2m-2}(k_m x)S_{2m-2}((1-2k_m)x)S_{2m-2}(k_m x) \qquad (7.21)$$

の漸化式で与えられる．ここで，パラメータ k_m は解析解 $k_m = 1/(2-2^{1/(2m-1)})$ で与えられる[5,6]．ところが，別な問題が生じる．それは，$k_m > 1$ となり，$m \to \infty$ で $S_{2m}(x)$ がもとの指数演算子に収束しないことである．これを解決するには，$r = 5$ として，次の標準分解公式と呼ばれる漸化式[5,6]を用いればよい：

$$S^*_{2m}(x) = \left[S^*_{2m-2}(p_m x)\right]^2 S^*_{2m-2}((1-4p_m)x) \left[S^*_{2m-2}(p_m x)\right]^2;$$
$$p_m = \frac{1}{4-4^{1/(2m-1)}}. \qquad (7.22)$$

明らかに，$m \geq 2$ のすべての m に対して，$\frac{1}{3} < p_m < \frac{1}{2}$ および $|1-4p_m| < \frac{2}{3}$ となり，$S^*_{2m}(x)$ はもとの指数演算子に収束することが証明できる[9]．特に，4 次の標準分解公式 $S^*_4(x) = S^2_2(p_2 x)S_2((1-4p_2)x)S^2_2(p_2 x)$ が多くの分野で広く利用されている．ただし，

$$S_2(x) = \mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_1} \cdots \mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_{q-1}} \mathrm{e}^{xA_q} \mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_{q-1}} \cdots \mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_1}; \quad p_2 = \frac{1}{4-4^{1/3}} \qquad (7.23)$$

である．

7.6 おわりに

以上のように，漸化式の方法を用いると，任意の次数まで解析的なパラメータを用いて容易に精度の良い近似公式が作れる．

参考文献

1) 鈴木増雄，本連載第 6 回，「数理科学」2015 年 2 月号（サイエンス社）．
2) 鈴木増雄，「手順の分離と統合—指数積分解，秩序形成およびエントロピー生成」，『数理物理　私の研究』（荒木不二洋/江口徹/大矢雅則編，丸善出版，2012 年）．
3) 例えば，Wikipedia の魔方陣の項目，http://ja.wikipedia.org/wiki/%E9%AD%94%E6%96%B9%E9%99%A3．
4) E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner, *Geometric Numerical Integration* (Springer, 2006).
5) M. Suzuki, *Phys. Lett. A* **146**, 314 (1990); ibid. **165**, 387 (1992).
6) M. Suzuki, *J. Math. Phys.* **32**, 400 (1991).
7) M. Suzuki, *Physica A* **191**, 501 (1992); ibid. **194**, 432 (1993); ibid. **205**, 65 (1994).
8) K. Umeno and M. Suzuki, *Phys. Lett. A* **181**, 387 (1993); M. Suzuki and K. Umeno, *Springer Proceedings in Physics* **76**, 74, edited by D.P. Landau *et al.* (1993).
9) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **163**, 491 (1994); *Rev. Math. Phys.* **8**, 487 (1996).
10) Z. Tsuboi and M. Suzuki, *Int. J. Mod. Phys. B* **9**, 3241 (1995).
11) H. Kobayashi, N. Hatano and M. Suzuki, *Physica A* **211**, 234 (1994).
12) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，2000 年）．
13) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 77, 477 (1976); ibid. **57**, 380 (1977), and ibid. *Suppl.* No.**64**, 402 (1978).
14) M. Suzuki, *Adv. Chem. Phys.* **46**, 195 (1981).
15) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* No.**195**, 114 (2012).
この論文では，佐藤–Guth の宇宙のインフレーションモデルとの関連性も議論している．また，不可逆的な輸送現象におけるエントロピー生成についても論じている．

（すずき・ますお，東京大学名誉教授）

経路積分と量子解析 第8回

いかにして量子現象を数理的に扱うか

手順の分離と指数積公式(2)

鈴木 増雄

8.1 はじめに

前回説明した指数演算子の積公式の理論[1]は，それまでの個々の近似公式を求める単発的な研究と異なり，「漸化式の方法」という極めて系統的な処法であり，高次の指数積公式を求めるのに大変有効である．今回は，今までの個々の近似公式も容易に導く一般的な方法論を説明し，その応用例を解説する．

8.2 指数演算子はなぜ重要か

多くの理論科学の解きたい問題は，関心のある量 $P(t)$ についての微分方程式 $dP(t)/dt = \Gamma P(t)$ の形に表される．ここで，Γ は $P(t)$ に作用する演算子（作用素）であり，簡単のために時間 t に依らないものとする．この方程式は形式的に解くことができ，$P(t) = \mathrm{e}^{t\Gamma} P(0)$ と表される．このように，指数演算子 $\mathrm{e}^{t\Gamma}$ は理論科学の至るところで重要な役割を果している．具体的に $P(t)$ の様子を知るためには，指数演算子 $\mathrm{e}^{t\Gamma}$ の働きを詳しく調べなければならない．演算子 Γ の固有関数や固有値が解析的にすべて求まる場合には，$P(t)$ が厳密に求まる．しかし，多くの場合，それは困難である．その困難な理由は，Γ そのものを厳密に取り扱おうとするからである．前回説明した「手順の分離」という考え方[1]にしたがって，演算子 Γ をいくつかの扱い易い（厳密に処理できる）演算子 $\{\Gamma_i\}$ の和に分解する：$\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \cdots + \Gamma_r$．ここで，仮定により，個々の指数演算子 $\{\mathrm{e}^{t\Gamma_i}\}$ は解析的に処理できるものとする．すなわち，すべての要素（行列要素など）が容易に与えられるとする．しかし，$\{\Gamma_i\}$ は互いに非可換なために，全体の指数演算子 $\mathrm{e}^{t\Gamma}$ を求めるには，何らかの近似的な取扱いが必要になる．すぐに思いつく方法は，短時間近似法，すなわち，次のような

テーラー展開 $\mathrm{e}^{t\Gamma} = 1 + t\Gamma + t^2\Gamma^2/2 + \cdots + t^n\Gamma^n/n! + \cdots$ を行い，n 次で近似する方法である．しかし，この展開近似には，もとの指数演算子の持つ対称性，例えば，ユニタリ性やシンプレックティックな性質などを保存しないという致命的な欠陥がある．それに比べて，指数積分解近似法（$\{\mathrm{e}^{p_i t\Gamma_i}\}$ の積で近似する方法）は，上記の対称性を保存している．対称性を保存する近似法であるという性質は，現象の本質を理解する上で大変重要である．それゆえに，筆者は若いときから，この指数積公式とその高次分解の研究にこだわってきたのである．

8.3 高次分解公式の一般論

(i) 問題の設定

ここでは，前節の記号 $\{\Gamma_i\}$ の代わりに $\{A_i\}$ を用いて，

$$\mathrm{e}^{x(A_1+\cdots+A_r)} = f_m(x) + \mathrm{O}(x^{m+1});$$
$$f_m(x) = \mathrm{e}^{t_1A_1}\cdots\mathrm{e}^{t_rA_r}\mathrm{e}^{t_{r+1}A_1}\mathrm{e}^{t_{r+2}A_2}\cdots\mathrm{e}^{t_MA_r} \tag{8.1}$$

の形の m 次近似式を求める方法を説明する．ただし，$\{t_j\}$ は x に比例する適当なパラメータである．

前回の第 7.4 節でも述べた通り，一番初等的な方法は，式 (8.1) の両辺のそれぞれの指数演算子を，$\{A_j\}$ の非可換性に配慮しながら x の m 次まで展開し，各項を整理し，両辺が演算子として m 次まで一致するように，パラメータ $\{t_j\}$ を決めることである．$r=2$ の場合でも m が 3 以上になると，見掛けによらず大変面倒になる．まして，一般の r に対しては，この初等的方法は絶望的である．

(ii) BCH 公式と交換子の作る自由リー代数の次元公式

ここでは，ベーカー・キャンベル・ハウスドルフ (Baker–Campbell–Hausdorff) の公式（以下，BCH 公式と略す）を利用する方法を説明する．式 (8.1) の右辺の $f_m(x)$ を一つのまとまった指数演算子の形に変形する：

$$f_m(x) = \exp[\Phi_m(xA_1, xA_2, \cdots, xA_r)]. \tag{8.2}$$

ここで，$\Phi_m(\{xA_j\})$ は，$\{A_j\}$ から作られる交換子 (交換関係 $[A_i, A_j]$, $\big[[A_i, A_j], A_k\big]$ など) の線形結合で表される (交換子の積 $[A_i, A_j]^2, [A_i, A_j]\times\big[[A_i, A_j], A_k\big]$ などは現れないことが証明できる)．そこで，k 次の交換子の全体を $\{Z_{k,j}; j = 1, 2, \cdots, w(k)\}$ と書くことにする．この自由リー代数の次元 $w(k)$ は，メービュウス関数 $\mu(d)$ を用いて

$$w(k) = \frac{1}{k}\sum_{d/k}\mu(d)r^{k/d} \tag{8.3}$$

と表される（ヴィット（Witt）の公式）[2]．ただし，記号 d/k は，d が k の約数であることを表す．また，メービュウス関数 $\mu(d)$ は，正の整数 d に対して，

$1, 0, -1$ だけの値をとり，$\mu(1)=1$，p が素数なら $\mu(p)=-1$，$k>1$ に対して $\mu(p^k)=0$，また，互いに素な b と c に対して $\mu(bc)=\mu(b)\mu(c)$ によって定義される．例えば，$\mu(2)=-1$, $\mu(3)=-1$, $\mu(4)=\mu(2^2)=0$, $\mu(5)=-1$, $\mu(6)=\mu(2)\mu(3)=(-1)\times(-1)=1$, $\mu(7)=-1$, $\mu(8)=\mu(2^3)=0,\cdots$．したがって，

$$
\begin{aligned}
&w(1)=\mu(1)r=r={}_r\mathrm{C}_1, \quad w(2)=\frac{1}{2}(\mu(1)r^2+\mu(2)r)=\frac{1}{2}r(r-1)={}_r\mathrm{C}_2,\\
&w(3)=\frac{1}{3}(\mu(1)r^3+\mu(3)r)=\frac{1}{3}r(r^2-1),\\
&w(4)=\frac{1}{4}(\mu(1)r^4+\mu(2)r^2+\mu(4)r)=\frac{1}{4}r^2(r^2-1),\\
&w(5)=\frac{1}{5}(\mu(1)r^5+\mu(5)r)=\frac{1}{5}r(r^4-1),\\
&w(6)=\frac{1}{6}(\mu(1)r^6+\mu(2)r^3+\mu(3)r^2+\mu(6)r)=\frac{1}{6}r(r^5-r^2-r+1)\\
&\qquad =\frac{1}{6}(r-1)r(r+1)(r^3+r-1),\cdots
\end{aligned}
\tag{8.4}
$$

となる．特に，2 つの演算子 A と B の作る自由リー代数の次元 $w(k)$ は，式 (8.4) で $r=2$ とおいて，$w(1)=2$, $w(2)=1$, $w(3)=2$, $w(4)=3$, $w(5)=6$, $w(6)=9,\cdots$ である．当然のことであるが，式 (8.4) からも $w(k)$ はすべての $k(\geq 1)$ と $r(\geq 2)$ に対して正の整数であることがわかる．

(iii) BCH 公式の役割と具体例

自由リー代数の次元 $w(k)$ について詳しく説明したのは，後で具体的に指数積公式を求める際に重要になるからである．実際，式 (8.2) の Φ_m を $m=1, r=2$ の場合に書き下すと，$\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B$ に対する次のような BCH 公式が得られる[2)]：

$$
\begin{aligned}
\log(\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B) \equiv \Phi_1(A,B) &= A+B+\frac{1}{2}[A,B]-\frac{1}{12}[[A,B],A]+\frac{1}{12}[[A,B],B]\\
&-\frac{1}{24}\Big[[[A,B],B],A\Big]-\frac{1}{720}\Big[\Big[[[A,B],B],B\Big],B\Big]\\
&+\frac{1}{720}\Big[\Big[[[A,B],A],A\Big],A\Big]+\frac{1}{180}\Big[\Big[[[A,B],A],A\Big],B\Big]\\
&-\frac{1}{180}\Big[\Big[[[A,B],A],B\Big],B\Big]+\frac{1}{120}\Big[[A,B],[[A,B],A]\Big]\\
&+\frac{1}{360}\Big[[A,B],[[A,B],B]\Big]+\cdots.
\end{aligned}
\tag{8.5}
$$

この例からも，それぞれの次数の交換子の数は対応する $\{w(k)\}$ の値を越えないことがわかる．両者はほとんど一致している．4 次の項は，たまたま 1 個しか現れないが，他にも独立な交換子としては，$\Big[[[A,B],A],A\Big]$ と $\Big[[[A,B],B],B\Big]$ がある．$r=3$ 以上の場合にも同様に Φ_m を求めることができるが，独立でない交換子が増えてくるので，表現形式が一意的でなくなり，上に求めた独立な数（次元数）$w(k)$ の表式はますます重要になってくる．例えば，3 個の演算子 A, B, C の 3 次の交換子のうち，A, B, C を 1 回ずつ含むものは $[[A,B],C]$, $[[B,C],A]$, $[[C,A],B]$ などがあるが，これら 3 個の和は 0 となり（ヤコビの恒等

式), 独立なものは 2 個である．この他にも，3 次の交換子としては，$[[A,B],A]$, $[[A,B],B]$, $[[B,C],B]$, $[[B,C],C]$, $[[C,A],C]$, $[[C,A],A]$ の 6 個の独立なものがあり，合計 8 個となる．$r=3$ に対する $w(3)$ は，式 (8.4) より，$w(3)=8$ となり，整合している．

(iv) 高次分解公式を与えるパラメータの決め方

さて，これだけの準備のもとに, 式 (8.2) の Φ_m を，自由リー代数の基底 $\{Z_{k,j}\}$ を用いて

$$\Phi_m = \sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{w(k)} a_{k,j}(\{t_i\})Z_{k,j} \equiv \sum_{j=1}^{r} a_{1,j}A_j + \sum_{k=2}^{\infty} x^k R_k \tag{8.6}$$

のように展開する．ただし，$w(1)=r$ および $Z_{1,j}=A_j$, $Z_{2,1}=[A_2,A_1]$, $Z_{2,2}=[A_3,A_1]$, $Z_{2,3}=[A_3,A_2],\cdots$ である．容易に，

$$a_{1,j} = \sum_{k=0} t_{j+kr} \tag{8.7}$$

であることがわかる．したがって, 式 (8.2) がもとの指数演算子 $\exp[x(A_1+\cdots+A_r)]$ の m 次近似式になるための条件は，式 (8.6) の第 1 項が $x(A_1+\cdots+A_r)$ と一致し，第 2 項は $R_2=R_3=\cdots=R_m=0$ の条件をみたさなければならないので，

$$a_{1,j}=x \quad (j=1,\cdots,r), \quad a_{k,j}=0 \quad (k=2,\cdots,m; j=1,\cdots,w(k)) \tag{8.8}$$

で与えられる．ここで，$a_{k,j}$ は $\{t_i\}$ の関数であるから，式 (8.8) はパラメータ $\{t_i\}$ を決める条件式となる．これが m 次の指数積を求める一般的な方法である．具体的に係数式 $\{a_{k,j}\}$ を求めるには，後の回で解説する「量子解析」を用いるのが便利である[2)]．

(v) m 次近似の基底の次元数

高次分解公式 (8.2) を与える指数の肩の m 次近似の演算子 Φ_m を構成する交換子の張る最小の線形空間の次元数 D_m は，自由リー代数の次元数 $\{w(k)\}$ を用いて，

$$D_m = w(1)+w(2)+\cdots+w(m) \tag{8.9}$$

と表される．特に，$r=2$ すなわち，2 つの演算子 A と B に対しては，式 (8.4) と (8.9) より，$D_1=w(1)=2$, $D_2=w(1)+w(2)=3$, $D_3=w(1)+w(2)+w(3)=5$, $D_4=8$, $D_5=14$, $D_6=23,\cdots$ となる．

(vi) 一般的定式化とテーラー展開による方法との比較

一般的定式化の決定的な重要性を理解するために，最初に述べた「一番初等的な方法」，すなわち，式 (8.1) の両辺を，非可換性を考慮に入れて，すべてテーラー展開し，両辺に現れるそれぞれの対応する項が互いに一致する条件からパラメータ $\{t_j\}$ を決める方法と比較してみよう．

簡単のために, $r=2$ の場合, すなわち, $\mathrm{e}^{x(A+B)}$ の指数積分解公式を求める「初等的な方法」を考える. m 次の項には, $(A+B)^m$ の展開式の演算子の数 2^m の種類の演算子 $(A^m, A^{m-1}B, BA^{m-1}, A^{m-2}BA, \cdots, B^m)$ が現れる. したがって, 展開で現れる m 次までの演算子の種類 $(A, B, A^2, AB, BA, B^2, \cdots, B^m)$ の数 N_m は $N_m = 2+2^2+\cdots+2^m = 2^{m+1}-2$ となる. ちなみに, $N_1=2$, $N_2=6$, $N_3=14$, $N_4=30$, $N_5=62$, $N_6=126, \cdots$ である.

この「一番初等的な方法」でパラメータ $\{t_j\}$ を決める方程式の数は, 一見したところ N_m という大きな数になる. 実際, この数 N_m は, Φ_m を張る最小の線形空間の次元数 D_m と比較すると, $m \gg 1$ のとき, $D_m \ll N_m$ となる. この事実は何を意味するのであろうか.

結論を先に言えば,「初等的な方法」で求める $\{t_j\}$ の決定方程式は互いに独立でないものが多く含まれ, 無駄が多いということである. すなわち, 式 (8.1) のパラメータ $\{t_j\}$ の数 M は, N_m より, はるかに小さな値で済むのである. この数学的事実に気づいていれば, 多くの研究論文は不要だったことになる. しかし, 研究の歴史を見ればわかるように, 皆このような無駄の上に革進的な発見があるのが常である.

上の状況を具体的に説明する. 実用的な 3 次近似や 4 次近似の公式の構成について, いきなり上の 2 つの方法を試みるのは, 大きな感動を味わうことはできるが, かなり繁雑になるので, (大変まわりくどいけれども) すでによく知られている 1 次近似や 2 次近似の公式から順に説明する.

(vi-a) 1 次近似の場合

式 (8.1) の両辺を x の 1 次まで展開し, x の 1 次の項を両辺書き下すと $xA+xB=(t_1+t_3+\cdots+t_{M-1})A+(t_2+t_4+\cdots+t_M)B$ となる. よって, 次の 2 つの方程式が得られる:

$$t_1+t_3+\cdots+t_{M-1}=x, \quad t_2+t_4+\cdots+t_M=x. \tag{8.10}$$

したがって, $M \geq 3$ 以上では不定方程式になり, $M=2$ に対して, $t_1=t_2=x$ が解となり, よく知られた 1 次近似公式

$$f_1(x)=\mathrm{e}^{xA}\mathrm{e}^{xB} \ (\text{または}\ \mathrm{e}^{xB}\mathrm{e}^{xA}) \tag{8.11}$$

が得られる. 一般論の立場から見ると, $D_1=N_1=2$ であるから, もともと $M=2$ として議論を始めてよかったのである (これは自明のことである!). 交換子は現れず, A と B を基底にした 2 次元の線形空間で話は済む.

(vi-b) 2 次近似の場合

次に, 式 (8.1) の両辺を 2 次近似まで展開すると, x の 2 次の項として

$$\begin{aligned}
&\frac{x^2}{2}(A^2+AB+BA+B^2)\\
&=\frac{1}{2}(t_1^2+t_3^2+2t_1t_3+\cdots)A^2+\frac{1}{2}(t_2^2+t_4^2+2t_2t_4+\cdots)B^2\\
&\quad+\{t_1(t_2+t_4+\cdots)+t_3(t_4+t_6+\cdots)+\cdots\}AB
\end{aligned}$$

$$+\{t_2(t_3+t_5+\cdots)+t_4(t_5+\cdots)+\cdots\}BA \tag{8.12}$$

のような演算子等式が得られる．それぞれの項を等置して，式 (8.10) の他に，次の 4 つの方程式

$$t_1^2+t_3^2+2t_1t_3+\cdots=x^2,\quad t_2^2+t_4^2+2t_2t_4+\cdots=x^2,$$
$$t_1(t_2+t_4+\cdots)+t_3(t_4+t_6+\cdots)+\cdots=\frac{x^2}{2},$$
$$t_2(t_3+t_5+\cdots)+t_4(t_5+\cdots)+\cdots=\frac{x^2}{2} \tag{8.13}$$

が得られる．こうして，$N_2=6$ に対応して 6 つの方程式が得られる．したがって，パラメータ $\{t_j\}$ の数 M は $M=6$ とすればよいことになる．このような答のわかっている問題でバカ正直に 6 元 2 次方程式を解こうとする人は皆無であろう．それでも解けと言われれば，$t_j=s_jx$ とおいてコンピュータで数値的に $\{s_j\}$ を求めるかもしれない．結果は，無数に解が現れ，不定となる．すでに賢明な読者は，6 つの方程式は独立ではなく，3 つまで減らせることにお気づきであろう．前もって，メービュウス関数 $\mu(k)$ を使った一般論を説明したのは，このための伏線であった．その一般論によると，2 次までの自由リー代数の次元 D_2 は，2 つの演算子 A,B（すなわち $r=2$ の場合）に対しては，式 (8.9) より $D_2=3$ であるから，上の状況は，容易に納得できるであろう．逆に一般論の数理的構造が，BCH 公式を通して，交換子のみの基底で表されることであるという本質が理解できる．すなわち，2 次近似の場合には，$A,B,[A,B]$ の 3 個の係数を決める問題に帰着される．

したがって，2 次近似の場合には，t_1,t_2,t_3 までの 3 つの指数積で分解でき，$t_1=t_3=\frac{x}{2}$, $t_2=x$ となり，2 次分解公式は，次のよく知られた対称式

$$S_2(x)=\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A}\mathrm{e}^{xB}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A}\ \ (\text{または } \mathrm{e}^{\frac{x}{2}B}\mathrm{e}^{xA}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}B}) \tag{8.14}$$

で与えられる．

ちなみに，方程式 (8.10) と (8.13) のうち，独立なものは，(8.10) の 2 つと式 (8.13) の第 3 また第 4 方程式のどちらか一つの合計 3 つである．これが一般論の $D_2=3$ の意味である．

(vi-c) 3 次以上の指数積公式の場合—「漸化式の方法」発見の糸口を与える

筆者は，1990 年前後から，他の分野での 3 次分解に関する多くの個々の研究を知らずに，幸いにも，一般の高次分解公式の研究に無鉄砲にも没頭した．最初は，「一番初等的なテーラー展開の方法」で，しかも，いきなり 3 次分解公式を求めようとして，展開パラメータ $\{t_j\}$ の数を少しずつ増やしながら，それらの連立方程式を解くことに労力を費やし，次のようなことに気づいた．

筆者の戦略は，できる限り簡単な表式で高次分解公式を作ることであったので，2 次近似公式でも現れた対称分解公式に目をつけた．2 次近似公式の求め方からわかる通り，まず 1 次近似の条件を求め，その後で対称化の条件 $t_1=t_3$ をつけ加えることにより，2 次近似が求まる．実は，この性質は，前回にも説

明した通り，一般の高次分解に関しても成り立つ定理である：

定理 8.1 奇数次の近似式，すなわち $(2m-1)$ 次の近似式 $S_{2m-1}(x)$ は次の意味で対称的，すなわち，

$$S_{2m-1}(x)S_{2m-1}(-x)=1,\ すなわち\ S_{2m-1}^{-1}(x)=S_{2m-1}(-x) \quad (8.15)$$

であれば，実は $S_{2m-1}(x)$ は $2m$ 次まで正しい．したがって，式 (8.1) の積の形で $2m$ 次近似対称公式を構成するための最小の数 $M_{\min}(2m)$ は

$$M_{\min}(2m)=w(1)+w(3)+w(5)+\cdots+w(2m-1) \quad (8.16)$$

で与えられる．

そこで，初等的方法で 3 次（したがって 4 次）近似公式を作る場合に，最初から対称式を対象にして考える．いろいろと試行錯誤の末（一般的な定式化に気づく前），対称な 3 次近似式を作るには，パラメータ $\{t_j\}$ は最小でも t_1,t_2,t_3,t_4 まで必要であることがわかった．すなわち，

$$S_3(x)=\mathrm{e}^{t_1A}\mathrm{e}^{t_2B}\mathrm{e}^{t_3A}\mathrm{e}^{t_4B}\mathrm{e}^{t_3A}\mathrm{e}^{t_2B}\mathrm{e}^{t_1A} \quad (8.17)$$

とおき，すべての指数演算子を 3 次まで展開し $\{t_j\}$ の決定方程式を具体的に労をいとわず書き下すと 14 個現れる．未知数の個数は 4 であり，方程式の個数のほうが大きいので，一見，解が存在しないように思われるが，適当に勘を働かせて 4 個の方程式を選び出し解いてみると，

$$t_1=\frac{1}{2}px,\quad t_2=px,\quad t_3=\frac{1-p}{2}x,\quad t_4=(1-2p)x;\ p=\frac{1}{2-2^{1/3}} \quad (8.18)$$

という解析的な解が見つかった．残りの 10 個の方程式にこの解を代入してみると，何と驚いたことにすべて解になっているではないか．そのときは，狐につままれたような気がしたものである．何と幸運な問題に出会ったことかと喜んだ．しかし，こんなことが起こるのは，この問題の背後に何か隠れた対称性があるに違いないと考え，解のパラメータ (8.18) を眺めながら，式 (8.17) の $S_3(x)$ をまとめ直してみた．すると，実に美しい次のような対称性をもつ形式を発見した：

$$\begin{aligned}S_3(x)=S_4(x)&=(\mathrm{e}^{t_1A}\mathrm{e}^{t_2B}\mathrm{e}^{t_1A})(\mathrm{e}^{(t_3-t_1)A}\mathrm{e}^{t_4B}\mathrm{e}^{(t_3-t_1)A})(\mathrm{e}^{t_1A}\mathrm{e}^{t_2B}\mathrm{e}^{t_1A})\\&=(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}pxA}\mathrm{e}^{pxB}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}pxA})(\mathrm{e}^{\frac{1-2p}{2}xA}\mathrm{e}^{(1-2p)xB}\mathrm{e}^{\frac{1-2p}{2}xA})(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}pxA}\mathrm{e}^{pxB}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}pxA})\\&=S_2(px)S_2((1-2p)x)S_2(px).\end{aligned} \quad (8.19)$$

このときの興奮は今でも忘れられない．なぜなら，この発見は単に 3 次近似，4 次近似を求めることだけでなく，任意の次数の公式を求める方法，すなわち，“漸化式” の方法の発見になっていたからである．すなわち，$S_{2m-2}(x)$ をもとにして $S_{2m}(x)$ が次のように簡単に構成できる：

$$S_{2m}(x) = S_{2m-1}(x) = S_{2m-2}(p_m x) S_{2m-2}((1-2p_m)x) S_{2m-2}(p_m x). \tag{8.20}$$

ただし，パラメータ p_m は式 (8.20) の指数積の x^{2m-1} の項が消える条件

$$2p_m^{2m-1} + (1-2p_m)^{2m-1} = 0;\ p_m = \frac{1}{2-2^{1/(2m-1)}} \tag{8.21}$$

で与えられる．もう一つの条件は x の 1 次がもとの指数演算子を与えるようにすることであり，式 (8.20) の $S_2(x)$ の変数を x の代わりに $p_m x$ とすると，残りの変数は自動的に $(1-2p_m)x, p_m x$ と決まってしまうのである．ここでも対称性は重要な働きをしている．要するに，パラメータに関する実質的な条件は，筆者の発見した対称解を求める方法では，たった一つの式 (8.21) になってしまうのである．これが，前回説明した “漸化式の方法” による高次分解の理論である．「漸化式」と言っても，数列の理論などで使われるものは式の係数まで固定されている．ここでの「漸化式」は形が漸化的であるが，そこに使われるパラメータは毎回変化していることに注意されたい．また，この漸化式の方法では，演算子 $\{A_j\}$ の数 r に関係なく高次分解公式が作れる．すなわち，

$$S_2(x) = \mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_1}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_2}\cdots\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_{r-1}}\mathrm{e}^{xA_r}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_{r-1}}\cdots\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_2}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_1} \tag{8.22}$$

から漸次，高次分解を作っていけばよい．この方法は，様々の他の漸化式へと無限に拡張できる「概念的な方法論」の提唱になっている．

このようにして，「初等的な解法」と「一般的定式化」とを比較すると，その本質的な違いとメリット・デメリットがわかる．後者では，M 個の個別の指数演算子 $\{\mathrm{e}^{t_j A}\}, \{\mathrm{e}^{t_k B}\}$ の積を一つの指数演算子にまとめて BCH 公式の形に変形するところが，一般論のキーポイントになる．この変形を効率的に行うには，後の回で詳しく解説する筆者の提唱した「量子解析」の方法を用いるとよい．

8.4 おわりに

今回，最後のところで説明した “初等的方法による高次分解” の研究は，一般的定式化に気づく前に行ったために却って “漸化式の方法” の発見という思いがけない幸運に恵まれた．このアイデアはどの分野の研究者も筆者の発見以前には気づかなかったものである[2,3]．

次回は，さらに様々な高次分解公式の作り方について解説し，その具体的な応用にふれたい．

参考文献

1) 鈴木増雄，本連載第 7 回，「数理科学」2015 年 3 月号（サイエンス社）．
2) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，2000 年）．
3) 大貫義郎，鈴木増雄，柏太郎，『経路積分の方法』（岩波書店，2000 年）の第 6 章．

（すずき・ますお，東京大学名誉教授）

経路積分と量子解析

いかにして量子現象を数理的に扱うか

第9回

手順の分離と指数積公式(3)

鈴木 増雄

9.1 はじめに

今回は，指数積公式の数理的側面と様々な拡張形式について解説する．特に，順序付け操作Pと対称化操作Sを用いた，指数演算子の一般分解理論を詳しく説明する．

前回説明した通り[1]，指数演算子の高次分解公式を求める一般的な方法の一つは，BCH公式[2]を利用して目指す指数積演算子を逆に一つの指数演算子にまとめて与えられた演算子と望む次数まで一致する条件を求めることである[3~5]．そこで，まず，BCH公式の本質である数理構造をもう一度詳しく議論しておく．

9.2 BCH公式の本質

非可換な演算子 $A_1, A_2, \cdots, A_r$ に対して

$$e^{A_1}e^{A_2}\cdots e^{A_r} = e^{\Phi(A_1, A_2, \cdots, A_r)} \tag{9.1}$$

で定義される $\Phi(\{A_j\})$ は $\{A_j\}$ の和と $\{A_j\}$ から作られる交換子の線形結合で表されることがBCHの本質である．このことは，次のフリードリックス(Friedrichs)の定理を用いて容易に示される．

定理 9.1 $\{A_j\}$ とは可換な演算子 $\{A'_j\}$ を考え，式(9.1)の $\{A_j\}$ の代わりに $\{A'_j\}$ を用いて $\Phi(\{A'_j\})$ を定義する．このとき，$\Phi(\{A_j\})$ が $\{A_j\}$ の和と交換子の線形結合で表されるための必要条件は

$$\Phi(\{A_j + A'_j\}) = \Phi(\{A_j\}) + \Phi(\{A'_j\}) \tag{9.2}$$

となることである．

これは交換子の性質から容易に示せる定理である．さらに，式 (9.1) と $\{A'_j\}$ に対する同形の式を用いて

$$\mathrm{e}^{\Phi(\{A_j+A'_j\})} = \mathrm{e}^{A_1+A'_1}\mathrm{e}^{A_2+A'_2}\cdots\mathrm{e}^{A_r+A'_r} = (\mathrm{e}^{A_1}\mathrm{e}^{A'_1})(\mathrm{e}^{A_2}\mathrm{e}^{A'_2})\cdots(\mathrm{e}^{A_r}\mathrm{e}^{A'_r})$$
$$= \mathrm{e}^{\Phi(\{A_j\})}\mathrm{e}^{\Phi(\{A'_j\})} = \mathrm{e}^{\Phi(\{A_j\})+\Phi(\{A'_j\})} \tag{9.3}$$

となり，式 (9.2) が導かれる．こうして，Φ の線形性が示される．

この Φ の線形性は，量子解析[6,7]を用いて Φ を具体的に変換子で表す一般的な表式を求めることによっても示すことができる．これは，後で量子解析を詳しく説明するときに，再びふれることにする．

9.3 ザッセンハウス（H.J. Zassenhaus）公式による指数積公式[2]

次の分解公式は古くから知られている：

$$\mathrm{e}^{x(A+B)} = \mathrm{e}^{xA}\mathrm{e}^{xB}\mathrm{e}^{x^2C_2}\mathrm{e}^{x^3C_3}\cdots. \tag{9.4}$$

ただし，$C_2, C_3, \cdots$ は次のように与えられる：

$$C_2 = \frac{1}{2}[B, A], \quad C_3 = \frac{1}{3}[C_2, A+2B], \cdots. \tag{9.5}$$

一般に，漸化的に

$$C_n = \frac{1}{n!}\left[\frac{\partial^n}{\partial x^n}\left(\mathrm{e}^{-x^{n-1}C_{n-1}}\cdots\mathrm{e}^{-x^2C_2}\mathrm{e}^{-xB}\mathrm{e}^{-xA}\mathrm{e}^{x(A+B)}\right)\right]_{x=0} \tag{9.6}$$

と与えられる[2]．具体的に $\{C_n\}$ を求めるには，BCH 公式 (8.5) をくり返し用いるほうが便利である．例えば，C_2 と C_3 は，BCH 公式 (8.5) より求まる式

$$\mathrm{e}^{xA}\mathrm{e}^{xB}\mathrm{e}^{x^2C_2}\mathrm{e}^{x^3C_3}$$
$$= \exp\left\{x(A+B) + \frac{x^2}{2}[A, B] + x^2C_2 + \frac{x^3}{12}[[B, A], A-B]\right.$$
$$\left. + \frac{x^3}{2}[A+B, C_2] + x^3C_3 + \mathrm{O}(x^4)\right\} \tag{9.7}$$

と，もとの $\mathrm{e}^{x(A+B)}$ とを比較して，容易に求まる．すなわち，

$$\frac{1}{2}[A, B] + C_2 = 0, \quad \frac{1}{2}[A+B, C_2] + \frac{1}{12}[[B, A], A-B] + C_3 = 0 \tag{9.8}$$

より，式 (9.5) が容易に導ける．

また，$\{C_n\}$ はすべて変換子の線形結合で表されることもわかる．この公式は，高次になるにつれてますます多くの変換子で表されるので，具体的な計算，特に数値計算にはあまり適していない．

9.4 対称化操作と順序付け操作による指数積公式の一般論[3,8,9]

(i) 対称化操作 S

前回説明した高次分解公式の一般論は BCH 公式を利用するものであり，その交換子による線形結合表示を求めることが主となる．この手続きは，美しい枠組みではあるが，非可換な演算子 $A_1, A_2, \cdots, A_r$ の数 r が増え，近似の次数が高くなるほど大変面倒になる．そこで今回は，物理的な視点で，よりわか

り易い一般論を解説する[3,8,9].

指数演算子には，通常の c-数 x で定義される指数関数の特徴

$$\mathrm{e}^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n \tag{9.9}$$

と，演算子の非可換性という量子的特徴の両面がある．式 (9.9) より，x, y が c-数のときは，$\mathrm{e}^{x+y} = \mathrm{e}^x \mathrm{e}^y$ という，良く知られた積公式が導かれる．しかし，一般の演算子 A, B に対しては，この積公式は成り立たない．そこで，久保[10]にしたがって，次の対称化操作 S を導入する：

$$\mathrm{S}(A^p B^q) = \frac{p!q!}{(p+q)!} \sum_{\mathrm{Permu}}^{\mathrm{all}} \mathrm{Permu}(A^p B^q). \tag{9.10}$$

ただし，Permu は A と B の順序を可能な限り入れ替える操作（置換）を表す．例えば,

$$\sum_{\mathrm{Permu}} \mathrm{Permu}(AB) = AB+BA, \quad \sum_{\mathrm{Permu}} \mathrm{Permu}(A^2B) = A^2B+ABA+BA^2 \tag{9.11}$$

である．式 (9.10) の右辺の係数 $p!q!/(p+q)!$ はその置換の数の逆数である．したがって，A と B が可換なときは，$\mathrm{S}(A^p B^q) = A^p B^q$ である．この記号を用いると,

$$\mathrm{e}^{A+B} = \mathrm{S}(\mathrm{e}^A \mathrm{e}^B) \tag{9.12}$$

という関係式が得られる．こうして，指数関数の特徴的な公式 $\mathrm{e}^{x+y} = \mathrm{e}^x \mathrm{e}^y$ をぎりぎりまで生かしながら変形し，最後に，非可換性（量子効果）を考慮する．これは正に「手順の分離」である[7~9]．一般に r 個の演算子 $\{A_j\}$ に対しても全く同様に

$$\mathrm{e}^{A_1+A_2+\cdots+A_r} = \mathrm{S}(\mathrm{e}^{A_1}\mathrm{e}^{A_2}\cdots\mathrm{e}^{A_r}) \tag{9.13}$$

が成り立つ．

(ii) 順序付け操作による指数積演算子のくり込まれた展開公式

与えられた指数演算子

$$\mathrm{e}^{x\mathscr{H}} \equiv \mathrm{e}^{x(A_1+A_2+\cdots+A_r)} \tag{9.14}$$

を個々の指数演算子 $\{\mathrm{e}^{xA_j}\}$ またはそれらの積で作られる低次の近似式 $G_1(x)$, $G_2(x), \cdots, G_s(x)$ の積で近似する問題を再び一般的な視点で考察する．そのために，パラメータ x を s 個の部分区間 $\{x_j\}$ に分ける：

$$x = x_1 + x_2 + \cdots + x_s. \tag{9.15}$$

ただし，$\{x_j\}$ は負の値をとることも許すことにする．さて，演算子の積

$$F_m(x) = G_1(x_1)G_2(x_2)\cdots G_s(x_s) \tag{9.16}$$

がもとの指数演算子 (9.14) の m 次近似式になるように分割パラメータ $\{p_j \equiv x_j/x\}$ を決定したい．そのためには，演算子 $F_m(x)$ を，もとの演算子 $\mathrm{e}^{x\mathscr{H}}$（$x$ の無限次まで含むくり込まれた指数演算子！）を出発点にして，x で展開すればよい．そこで，演算子 $G_j(x)$ は s_j 近似式であるとし，次の形で表されるも

のとする：

$$G_j(x) = \exp\left(x\mathscr{H} + x^{s_j+1}R_{js_j+1} + x^{s_j+2}R_{js_j+2} + \cdots\right). \tag{9.17}$$

ここで，$R_{j,k}$ は $\{A_j\}$ で構成される k 次の演算子である．表記を簡単化するために，不必要な低次の補正（本当は零の部分）まで形の上では入れて

$$G_j(x_j) = \exp\left(\sum_{k=1}^{\infty} x_j^k R_{jk}\right) \ ; \ R_{j1} = \mathscr{H} \tag{9.18}$$

と書くことにする．ただし，R_{j1} は j によらず $R_{j1} = \mathscr{H}$ である．この表記を用いると，式 (9.16) は

$$\begin{aligned} F_m(x) &= \prod_{j=1}^{s} \exp\left(\sum_{k=1}^{\infty} x_j^k R_{jk}\right) = \mathrm{P}\exp\left(\sum_{j=1}^{s}\sum_{k=1}^{\infty} x_j^k R_{jk}\right) \\ &= \mathrm{P}\exp\left(xY_1 + x^2Y_2 + \cdots + x^nY_n + \cdots\right) \end{aligned} \tag{9.19}$$

と表せる．ただし，$\{Y_k\}$ は次式で定義される演算子である：

$$Y_k = \sum_{j=1}^{s} p_j^k R_{jk} \ ; \ p_j = \frac{x_j}{x}. \tag{9.20}$$

また，P は次のように定義される“順序付け操作”を表す：

$$\mathrm{P}(R_{jk}R_{lm}) = \begin{cases} R_{jk}R_{lm}\cdots & (j < l), \\ R_{lm}R_{jk}\cdots & (l < j). \end{cases} \tag{9.21}$$

さらに，式 (9.10) で定義される対称化操作 S を，同じ添字 j の R_{jk}, R_{lm}, $\cdots$ に対して用いると，式 (9.19) は

$$F_m(x) = \sum_{n_1,n_2,n_3,\cdots} \frac{x^{n_1+2n_2+3n_3+\cdots}}{n_1!n_2!n_3!\cdots}\mathrm{SP}(Y_1^{n_1}Y_2^{n_2}Y_3^{n_3}\cdots) \tag{9.22}$$

と表せる．ここで，Y_1 は特別な役割を果しており，式 (9.20) より，R_{j1} は j によらず $\mathscr{H}$ に等しいから，

$$Y_1 = \sum_{j=1}^{s} p_j R_{j1} = \left(\sum_{j=1}^{s} p_j\right)\mathscr{H} = \mathscr{H} \tag{9.23}$$

となり，Y_1 はもとの演算子 $\mathscr{H}$ に等しいことがわかる．そこで，式 (9.22) の $F_m(x)$ に対する一般表式の中から，$n_2 = n_3 = \cdots = 0$ の部分のみをとり出して，n_1 について和をとることにより，目指していた展開公式

$$F_m(x) = \mathrm{e}^{x\mathscr{H}} + \sum_{n_1,n_2,n_3,\cdots}{}' \frac{x^{n_1+2n_2+3n_3+\cdots}}{n_1!n_2!n_3!\cdots}\mathrm{SP}(Y_1^{n_1}Y_2^{n_2}Y_3^{n_3}\cdots) \tag{9.24}$$

が得られる．ただし，記号 $\sum'$ は $n_2 = n_3 = \cdots = 0$ の場合を除く和を表す．

式 (9.24) は，次の高次分解の出発点になる有用な一般展開公式である．「手順の分離」の処方である操作 P と S の導入の有効性[3,8,9]に注目してほしい．

(iii) 指数演算子高次分解の一般的処方

指数演算子の一般展開公式 (9.24) を用いると，$F_m(x)$ が与えられたもとの指数演算子 $\mathrm{e}^{x\mathscr{H}}$ の m 次近似式になるための必要十分条件は，式 (9.24) の右辺の第 2 項が x^m の項まで演算子として零になることである．したがって，少なくとも，十分条件は，

“$n_2 = n_3 = \cdots = 0$ を除き，$n_1 + 2n_2 + 3n_3 + \cdots + mn_m \le m$ をみたすすべての正の整数 $n_1, n_2, n_3, \cdots$ に対して

$$\mathrm{SP}(Y_1^{n_1} Y_2^{n_2} Y_3^{n_3} \cdots) = 0 \tag{9.25}$$

となること”

である．

次数 m が大きくなると，式 (9.25) は互いに独立でなくなる場合が起こり得るので注意が必要である[11]．式 (9.25) で操作 SP を行うまでは，Y_1 の中の $p_j \mathscr{H}$ の p_j と $\mathscr{H}$ を切り離してはならない．同様に Y_n の中の p_j^n と R_{jn} も切り離さず 1 つのものとして扱わなければならない．後で示すように，R_{jn} が j に依らないときは，この注意は肝要である．例えば，

$$\mathrm{P}\{(p_j\mathscr{H})(p_k^n R_n)\} = \begin{cases} (p_j\mathscr{H})(p_k^n R_n) = (p_j p_k^n)\mathscr{H} R_n & (j < k), \\ (p_k^n R_n)(p_j\mathscr{H}) = (p_j p_k^n) R_n \mathscr{H} & (k < j) \end{cases} \tag{9.26}$$

となる．同じ添字 j に対しては，

$$\mathrm{S}\{(p_j\mathscr{H})(p_j^n R_n)\} = p_j^{n+1} \cdot \frac{1}{2}(\mathscr{H} R_n + R_n \mathscr{H}) \tag{9.27}$$

のように対称化操作 S が行われる．

(iv) 一つだけの近似式（$G_1(x) = G_2(x) = \cdots = G_s(x) \equiv G(x)$）による展開

式 (9.16) の右辺の $G_j(x)$ がすべて同じ近似式の場合には，式 (9.18) の R_{jk} が添字 j に依らなくなる．例えば，$G(x)$ と 1 次近似式

$$G(x) = F_1(x) = \mathrm{e}^{xA_1}\mathrm{e}^{xA_2} \cdots \mathrm{e}^{xA_r} \tag{9.28}$$

を用いて，上の一般的処方で $m(\ge 2)$ 次近似公式を作る場合を考えてみる．その条件の中には，式 (9.25) からわかるように，

$$\mathrm{SP}(Y_n) = \left(\sum_{j=1}^{s} p_j^n\right) R_n = 0 \quad (n = 2, 3, \cdots, m) \tag{9.29}$$

の条件式もある．これは次の連立方程式を与える：

$$\sum_{j=1}^{s} p_j^n = 0 \quad (n = 2, 3, \cdots, m). \tag{9.30}$$

偶数の n が含まれているので，この解 $\{p_j\}$ は必ず複素数となってしまう．実用上は，展開パラメータ $\{p_j\}$ は実数であるのが望ましい．唯一実数になるのは，$G(x)$ が $2m$ 次近似式で，$(2m+1)$ 次近似式 $F_{2m+1}(x)$ を作る場合である．この場合には，条件式 (9.25) は一つだけになり，それは，

$$\mathrm{SP}(Y_{2m+1}) = \left(\sum_{j=1}^{s} p_j^{2m+1}\right) R_{2m+1} = 0, \tag{9.31}$$

すなわち

$$\sum_{j=1}^{s} p_j^{2m+1} = 0 \tag{9.32}$$

となるから，実数解が存在することになる．第 7 回で説明した漸化式の方法による解はこの例になっている[12]．

(v) 2 つだけの近似式による実分解公式

まず，1 次漸化式 (9.28) に対して，次のように定義されるチルダ（tilde）演算子 $\tilde{G}(x) = \tilde{F}_1(x)$ を考える[3~5)]：

$$\tilde{G}(x) = \tilde{F}_1(x) = (F_1(-x))^{-1} = (G(-x))^{-1} \\ = e^{xA_r} e^{xA_{r-1}} \cdots e^{xA_2} e^{xA_1}. \tag{9.33}$$

明らかに，このチルダ演算子 $\tilde{G}(x)$ は，式 (9.17) の形で表すと，

$$G(x) = \exp(x\mathscr{H} + x^2 R_2 + x^3 R_3 + \cdots) \tag{9.34}$$

に対して

$$\tilde{G}(x) = \exp(x\mathscr{H} - x^2 R_2 + x^3 R_3 + \cdots + (-1)^{n-1} x^n R_n + \cdots) \tag{9.35}$$

となる．

さて，m 次近似式 $F_m(x)$ をこれら 2 つの 1 次式を交互に積を作った次式で構成する方法を考える：

$$F_m(x) = G(p_1 x)\tilde{G}(p_2 x)G(p_3 x)\tilde{G}(p_4 x) \cdots G(p_{s-1} x)\tilde{G}(p_s x). \tag{9.36}$$

ただし，s は偶数である．この分解の利点は，式 (9.20) で定義される $\{Y_n\}$ が n が偶数のとき，負符号を含むようになることである．すなわち，

$$Y_{2n} = \sum_{j=1}^{s} (-1)^{j-1} p_j^{2n} R_{2n}, \quad \text{および} \quad Y_{2n-1} = \sum_{j=1}^{s} p_j^{2n-1} R_{2n-1}. \tag{9.37}$$

式 (9.29) に対応する条件は

$$\mathrm{SP}(Y_{2n}) = \left(\sum_{j=1}^{s} (-1)^{j-1} p_j^{2n} \right) R_{2n} = 0 \tag{9.38}$$

という条件式に変わり，これは

$$\sum_{j=1}^{s/2} p_{2j-1}^{2n} - \sum_{j=1}^{s/2} p_{2j}^{2n} = 0 \tag{9.39}$$

となるから，実数解を持つようにパラメータ $\{p_j\}$ を決められることになる[3~5)]．

こうして，非対称な実分解の一般的なスキームが見つかった[3~5)]．

(v-a) 2 次の分解公式

2 次近似のパラメータ $\{p_j\}$ に対する条件は，式 (9.39) より

$$p_1^2 + p_3^2 + \cdots + p_{s-1}^2 = p_2^2 + p_4^2 + \cdots + p_s^2 \tag{9.40}$$

で与えられる（ただし，s は偶数）．自明な条件式

$$p_1 + p_2 + \cdots + p_s = 1 \tag{9.41}$$

と合わせると，$s = 2$ でも解 $p_1 = p_2 = \frac{1}{2}$ が存在する．こうして，よく知られた 2 次の対称な近似式

$$S_2(x) = G\left(\frac{x}{2}\right)\tilde{G}\left(\frac{x}{2}\right) = F_1\left(\frac{x}{2}\right)\tilde{F}_1\left(\frac{x}{2}\right) \tag{9.42}$$

が再現される．

さらに，$s = 3$ とすると，パラメータ $\{p_j\}$ は式 (9.40) より，

$$p_1^2 + p_3^2 = p_2^2, \quad \text{および} \quad p_1 + p_2 + p_3 = 1 \tag{9.43}$$

の条件式をみたす．したがって，無数の実数解が存在する．特に，有理数解

$$p_1 = \frac{m-n}{2m}, \quad p_2 = \frac{m^2+n^2}{2m(m+n)}, \quad p_3 = \frac{n}{m+n} \tag{9.44}$$

が無数に存在する．ただし，m, n は $m(m+n) \neq 0$ をみたす任意の整数である[3~5]．例えば，$p_1 = 1/4, p_2 = 5/12, p_3 = 1/3$ は解である．すなわち，

$$F_2(x) = F_1\left(\frac{x}{4}\right)\tilde{F}_1\left(\frac{5}{12}x\right)F_1\left(\frac{x}{3}\right) \tag{9.45}$$

は有理数パラメータの非対称な 2 次分解公式になっている．

(v-b) 3 次の非対称な分解公式

一般論にしたがえば，3 次式に対するパラメータ $\{p_j\}$ を決める条件式は，$p_1 + p_2 + \cdots + p_s = 1$ の他に，

$$\mathrm{SP}(Y_2) = 0, \quad \mathrm{SP}(Y_3) = 0, \quad \mathrm{SP}(Y_1Y_2) = 0 \tag{9.46}$$

である．上の第 1 式は，

$$p_1^2 + p_3^2 + \cdots = p_2^2 + p_4^2 + \cdots \tag{9.47}$$

となり，第 2 式は

$$p_1^3 + p_2^3 + p_3^3 + \cdots + p_s^3 = 0 \tag{9.48}$$

となる．上の第 3 式は少し複雑になる．すなわち，第 3 式の左辺は，操作 P と S の定義より，

$$\mathrm{SP}(Y_1Y_2) = \alpha(\{p_k\})\mathscr{H}R_2 + \beta(\{p_k\})R_2\mathscr{H} \tag{9.49}$$

の形になる．ただし，

$$\alpha(\{p_k\}) = \sum_{k=1}^{s} a_k p_k \ ; \ a_k = \sum_{j<k}(-1)^{j-1}p_j^2 + \frac{1}{2}(-1)^{k-1}p_k^2, \tag{9.50}$$

および

$$\beta(\{p_k\}) = \sum_{k=1}^{s} b_k p_k \ ; \ b_k = \sum_{j>k}(-1)^{j-1}p_j^2 + \frac{1}{2}(-1)^{k-1}p_k^2 \tag{9.51}$$

である．式 (9.50) と条件式 $\mathrm{SP}(Y_1Y_2) = 0$ より，

$$\alpha(\{p_k\}) = 0, \quad \text{および} \quad \beta(\{p_k\}) = 0 \tag{9.52}$$

という具体的な式が導かれる．

前回[1]説明した BCH 定理に基づく一般分解理論に比べて条件式は求め易いが，必要十分条件式ではないので，互いに独立でない条件式が現れることがあることに注意する必要がある．今回の定式化は，$\{A_j\}$ の数 r に依らないので，必要な条件式は，$p_1 + p_2 + \cdots + p_s = 1$ の他には，前回の式 (8.4) より，$w(2) + w(3) = 3$ 個のはずである．上に求めた条件式の数は 4 個であるから，どれか独立でない式が含まれている．実際に，式 (9.47) は，k によらず $a_k + b_k = 0$ と書けるので，$\alpha(\{p_k\})$ と $\beta(\{p_k\})$ の間には，

$$\alpha(\{p_k\}) + \beta(\{p_k\}) = 0 \tag{9.53}$$

という関係が成り立つ．したがって，式 (9.52) の 2 つの条件は，一つにまとめられ，第 1 式 $\alpha(\{p_k\}) = 0$ だけでよいことがわかる．こうして，上の 3 つの条件式と

$$p_1 + p_2 + \cdots + p_s = 1 \tag{9.54}$$

との連立方程式を解いて，$\{p_j\}$ を求めればよいことになる．独立な条件式が全部で 4 個になるので，パラメータ $\{p_j\}$ の数 s は $s \geq 4$ でなければならない．しかし，$s = 4$ の場合には，実数解がない．そこで，$s = 5$ の場合について詳しく調べてみる．条件式 $\alpha(\{p_k\}) = 0$ は，条件式 (9.47), (9.48), (9.54) を用いて変形すると，

$$\alpha(\{p_k\}) = (p_1^2 - p_2^2)(p_2 + p_3) - p_5^2(p_4 + p_5) = 0 \tag{9.55}$$

となる．連立方程式 (9.47), (9.48), (9.54), (9.55) には，次の有理数解

$$p_1 = \frac{7}{24}, \quad p_2 = p_3 = \frac{3}{8}, \quad p_4 = -\frac{25}{24}, \quad p_5 = 1 \tag{9.56}$$

があることがわかる．実際，平方数の関係式 $7^2 + 24^2 = 25^2$ および立方数の関係式 $7^3 + 9^3 + 9^3 + 24^3 = 25^3$ などを用いて確かめられる（もちろん，この他にも無数の実数解が存在する）．このように，指数積公式の有理数解を求めることが，フェルマー（P. de Fermat）の大定理と関係する整数方程式論に帰着されることは興味深い[5,7]．特に，この解を，$r = 2$ の場合，すなわち，$\exp[x(A+B)]$ の 3 次分解公式の場合に書き下すと，よく知られた Ruth の分解公式[13]

$$F_3^{(\mathrm{R})}(x) = \mathrm{e}^{\frac{7}{24}xA}\mathrm{e}^{\frac{2}{3}xB}\mathrm{e}^{\frac{3}{4}xA}\mathrm{e}^{-\frac{2}{3}xB}\mathrm{e}^{-\frac{1}{24}xA}\mathrm{e}^{xB} \tag{9.57}$$

になっていることがわかる．

このように，順序付け操作 P と対称化操作 S を用いた指数積公式の一般論が大変有効であることがわかる[3~7]．

9.5 まとめ

今回は，BCH 定理とその公式を用いずに，2 つの操作 P と S だけを用いる指数積公式の一般論とその具体的な応用例を説明した．次回からは，非可換な関数の微分とテーラー展開に関する新しい方法，いわゆる「量子解析」とその指数積分解や BCH 公式への応用を解説する．

参考文献

1) 鈴木増雄，本連載第 8 回，「数理科学」2015 年 5 月号（サイエンス社）．
2) M. Suzuki, *Commun. math. Phys.* **51**, 183 (1976), および **57**, 193 (1977).
3) M. Suzuki, *Phys. Lett. A* **165**, 387 (1992).
4) M. Suzuki, *Proc. Japan Acad.* **69**, Ser.B, 161 (1993).
5) 大貫義郎，鈴木増雄，柏太郎，『経路積分の方法』（岩波書店，現代物理学叢書，2000 年）の第 6 章．
6) M. Suzuki, *Commun. math. Phys.* **183**, 339 (1997).
7) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，現代物理学叢書，2000 年）．
8) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 3015 (1992).
9) M. Suzuki, *Physica A* **191**, 501 (1992).
10) R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **17**, 1100 (1962).
11) Z. Tsuboi and M. Suzuki, *Int. J. Mod. Phys. B* **9**, No.25, 3241 (1995). "リンドン語（Lyndon words）" を用いた数学的な論文．
12) 鈴木増雄，本連載第 7 回，「数理科学」2015 年 3 月号（サイエンス社）．
13) R.D. Ruth, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-30**, 2669 (1983).

（すずき・ますお，東京大学名誉教授）

経路積分と量子解析

いかにして量子現象を数理的に扱うか

第10回

量子解析(1)

非可換微分法と交換関係の計算公式

鈴木 増雄

10.1 はじめに

今回は量子解析[1~6]すなわち非可換微分法について解説する．まず，非可換微分法の定式化を行う．その際，古典的な微分法との対応関係が明瞭であることを主眼とする．ここでも，「量子古典対応」という視点で考える[1~6]．

10.2 量子解析の定式化のモチベーション

数理科学の多くの分野，特に量子物理学の分野では，非可換な演算子を扱うことが多い．量子力学や量子統計力学[2]では，それぞれ基礎方程式のハイゼンベルグ方程式やフォン・ノイマン方程式が交換関係を用いて表される．したがって，任意の2つの演算子関数 $f(A)$ と $g(B)$ との交換関係 $[f(A), g(B)]$ が A と B の交換子 $[A, B]$ を用いて簡潔に表されると大変便利である．また，摂動計算では，演算子関数 $f(A+B)$ を演算子 B で展開する必要に迫られる．これらの要求に答えようとして，筆者は「量子解析」を定式化した[3~6]．

10.3 量子微分の定義と公式

もともと，古典的な微分は，関数 $f(x)$ の変化率 $\Delta f(x)/\Delta x$ の極限として定義される：

$$f'(x) \equiv \frac{df(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta f(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}. \qquad (10.1)$$

これは，次の全微分

$$df(x) \equiv \lim_{h \to 0} \frac{f(x+hdx) - f(x)}{h} = f'(x)dx \qquad (10.2)$$

の形に書き直すことができる．

演算子 A の関数 $f(A)$ に対しても，次のガトウ微分（Gâteaux differential）を定義することができる：

$$df(A) = \lim_{h\to 0} \frac{f(A+hdA)-f(A)}{h}. \tag{10.3}$$

しかし，古典的な微分 (10.2) の場合と異なり，量子的な微分 (10.3) の場合には，A と dA が一般に非可換であるために，式 (10.3) の内容は一変する．すなわち，$df(A)$ は（演算子）$\times\, dA$ の形の 2 つの演算子の積で表すことはできなくなるのである．例えば，簡単な演算子関数 $f(A)=A^2$ の場合でも，式 (10.3) は，

$$df(A) = dA^2 = \lim_{h\to 0} \frac{(A+hdA)^2 - A^2}{h} = A\cdot dA + (dA)\cdot A \tag{10.4}$$

となり，単純な 2 つの演算子の積の形にはならない．量子古典対応という視点に立って，古典的な微分の形 (10.2) にできる限り近い形で表すことを試みる．そのために，次のように定義される「内部微分」δ_A を導入する：任意の演算子 B に対して

$$\delta_A B = [A, B] \tag{10.5}$$

と定義する（δ_A のように演算子を他の演算子に変換する演算子を超演算子と呼ぶ）．この δ_A を「…微分」と呼ぶのは，微分の特徴である，次のライプニッツ（D.G. Leibniz）の規則

$$\delta_A(BC) = (\delta_A B)C + B(\delta_A C) \tag{10.6}$$

をみたしているからである．これは，古典的なライプニッツの規則（任意の 2 つの関数 $f(x)$ と $g(x)$ の積の微分に関する関係式）

$$(f(x)g(x))' = f'(x)g(x) + f(x)g'(x) \tag{10.7}$$

の拡張になっている．

この超演算子 δ_A を用いると，式 (10.4) は

$$dA^2 = (2A - \delta_A)dA \tag{10.8}$$

と書ける．式 (10.8) のカッコの中の A を演算子 dA に左から A をかける超演算子 L_A と解釈すると，2 つの超演算子は互いに可換である：

$$A\delta_A \equiv L_A\delta_A = \delta_A L_A. \tag{10.9}$$

そこで，一般の演算子関数 $f(A)$ に対して，$df(A)$ を

$$df(A) = (A \text{ と } \delta_A \text{の関数})dA \tag{10.10}$$

の形で表すことにする．上式のカッコの中の超演算子を $f(A)$ の「量子微分」と呼び，古典的な微分と同様に

$$\frac{df(A)}{dA}$$

と書くことにする．したがって，

$$df(A) = \frac{df(A)}{dA}\cdot dA \tag{10.11}$$

と表せることになり，古典の場合との対応がつき便利である．しかし，中身は異質である．

こうして，前の簡単な例 $f(A) = A^2$ の場合には，

$$\frac{dA^2}{dA} = 2A - \delta_A \tag{10.12}$$

となる．微分 dA が A と可換な場合（すなわち，本質的に古典的な場合）には，式 (10.12) の δ_A は零とみなせるので，古典的な微分 $2A$ に帰着される．このように，上の定式化では，量子古典対応が見易い．

次に，任意の正の整数 n に対して A^n の量子微分を求めよう．容易に

$$\begin{aligned} dA^n &= \lim_{h\to 0}\frac{(A+hdA)^n - A^n}{h} = \sum_{j=1}^{n} A^{j-1}(dA)A^{n-j} \\ &= \left(nA^{n-1} - \sum_{j=1}^{n} A^{j-1}\delta_{A^{n-j}}\right)\cdot dA \equiv \frac{dA^n}{dA}\cdot dA \end{aligned} \tag{10.13}$$

となることがわかり，量子微分 dA^n/dA が一応求まる[3]．しかし，この表示では内部微分の種類が多過ぎるので，δ_{A^m} を A と δ_A だけで表すことにする[3]．まず，右から A を作用させる操作 R_A と書くと，$R_A Q = QA$ であり δ_A は $\delta_A = L_A - R_A = A - R_A$ とも書ける．したがって，次の公式が成り立つ．

公式 10.1　任意の演算子関数 $f(A)$ に対して，次式が成り立つ：

$$\delta_{f(A)} = f(L_A) - f(R_A) = f(A) - f(A - \delta_A). \tag{10.14}$$

この公式のように，R_A を用いずに，A と δ_A だけで量子微分を表すと，量子古典対応が一目瞭然となり便利である．これが量子解析の定式化の特徴である．すなわち，式 (10.13) の $\delta_{A^{n-j}}$ を A と δ_A を用いて

$$\delta_{A^{n-j}} = A^{n-j} - (A - \delta_A)^{n-j} \tag{10.15}$$

と書き換えると，

$$dA^n = \left(\sum_{j=1}^{n} A^{j-1}(A-\delta_A)^{n-j}\right)\cdot dA = \frac{A^n - (A-\delta_A)^n}{\delta_A}\cdot dA \tag{10.16}$$

となる．超演算子 δ_A の逆 δ_A^{-1} は存在しないが，A と δ_A は可換であるから，通常の数のように通分することができる．したがって，量子微分の定義式 (10.11) と比較すると，

$$\frac{dA^n}{dA} = \frac{A^n - (A-\delta_A)^n}{\delta_A} \tag{10.17}$$

が成り立つ．式 (10.14) を用いて，一般に次の量子微分の公式が導ける．

公式 10.2　任意の演算子関数 $f(A)$ に対して，次式が成り立つ：

$$\frac{df(A)}{dA} = \frac{f(A) - f(A-\delta_A)}{\delta_A} = \frac{\delta_{f(A)}}{\delta_A} = \int_0^1 f^{(1)}(A - t\delta_A)dt. \tag{10.18}$$

ただし，$f^{(1)}(x)$ は通常の古典的な 1 階微分 (10.1) を表す．

公式 (10.18) には様々な興味深い特徴がある．まず第 1 に，量子微分 $df(A)/dA$ は 2 つの内部微分 $\delta_{f(A)}$ と δ_A の比で表されることである．すなわち，それは超演算子の差分形式になっている．

第 2 に，それは，通常の古典的な微分を基に量子効果（すなわち，非可換性 δ_A）を積分の形で取り込んでいる．特に，式 (10.18) の最後の積分公式は，高次の量子微分を定式化する際にも重要となる表現形式であり，筆者の提唱した量子解析の大きな特色を与えるものである[1~6]．

また，ガトウ微分 $df(A)$ の定義式 (10.3) と量子微分の定義式 (10.11) とを統合し，任意の dA を改めて B とおき

$$f(A+xB) = f(A) + x\frac{df(A)}{dA}\cdot B + \mathrm{O}(x^2) \tag{10.19}$$

という 1 次のテーラー展開の形で捉えることができる．

10.4 ライプニッツの規則による量子微分の公式の導出

前に述べた通り，微分の基本的な性質は，抽象的には，それがライプニッツの規則 (10.6) または (10.7) をみたすことにある．したがって，逆に，この規則をみたす作用はすべて「一般化された微分」とみなすことができる．そこで，この立場で，再び量子微分の公式を導いてみよう．

量子微分 $df(A)/dA$ は式 (10.11) で定義されるので，ライプニッツの規則から，$df(A)$ と dA の関係を導くことにする．

恒等式 $Af(A) = f(A)A$ の全微分をとると，ライプニッツの規則より，

$$(dA)f(A) + Adf(A) = (df(A))A + f(A)dA \tag{10.20}$$

となる．これを内部微分 $\delta_A, \delta_{f(A)}$ を用いて書き直すと次式が得られる：

$$\delta_A df(A) = \delta_{f(A)}dA, \quad \therefore df(A) = \frac{\delta_{f(A)}}{\delta_A}dA. \tag{10.21}$$

よって，量子微分の定義式 (10.11) より，再び，量子微分の公式 (10.18) が簡潔に導かれる[1~6]．この導出法は，後で示すように，高次の量子微分の公式を導く際には，特に有用である[1~6]．

10.5 量子微分の様々な公式とそれらの応用

演算子 A がパラメータ t（例えば時間）の関数 $A = A(t)$ の場合には，次の公式が成り立つ．

公式 10.3　任意の演算子関数 $f(A)$ $(A = A(t))$ に対して，次式が成り立つ：

$$\frac{d}{dt}f(A(t)) = \frac{df(A(t))}{dA(t)}\frac{dA(t)}{dt}. \tag{10.22}$$

証明　式 (10.22) の左辺の微分は通常の定義により，

$$\frac{df(A(t))}{dt} = \lim_{h\to 0}\frac{f(A(t+h))-f(A(t))}{h} = \lim_{h\to 0}\frac{f(A(t)+hA'(t))-f(A(t))}{h} \tag{10.23}$$

となる．式 (10.19) において $B = A'(t) \equiv dA(t)/dt$ とおくと，式 (10.23) より式 (10.22) が導かれる．

この公式は物理などによく応用されつつある[1~6]．

また，次の公式も容易に導ける．

公式 10.4 演算子関数の合成関数 $f(g(A))$ に対して，次式が成り立つ：

$$\frac{df(g(A))}{dA} = \frac{df(g(A))}{dg(A)}\frac{dg(A)}{dA}. \tag{10.24}$$

証明 量子微分の公式 (10.18) より，式 (10.24) の右辺は

$$\frac{df(g(A))}{dg(A)}\frac{dg(A)}{dA} = \frac{\delta_{f(g(A))}}{\delta_{g(A)}}\frac{\delta_{g(A)}}{\delta_A} = \frac{\delta_{f(g(A))}}{\delta_A} = \frac{df(g(A))}{dA} \tag{10.25}$$

となり，式 (10.24) が示される．

また，次の公式も役立つことがある．

公式 10.5 任意の 2 つの演算子関数 $f(A)$ と $g(A)$ の積 $f(A)g(A)$ に対して，次式が成り立つ：

$$\begin{aligned}\frac{d}{dA}(f(A)g(A)) &= f(A)\frac{dg(A)}{dA} + \frac{df(A)}{dA}(g(A)-\delta_{g(A)}) \\ &= \frac{df(A)}{dA}g(A) + \frac{dg(A)}{dA}(f(A)-\delta_{f(A)}).\end{aligned} \tag{10.26}$$

証明 容易に導ける関係式[1~6]

$$\delta_{f(A)g(A)} = f(A)\delta_{g(A)} + g(A)\delta_{f(A)} - \delta_{f(A)}\delta_{g(A)}$$

より明らかである．

10.6 交換関係の計算公式

前節で導いた量子微分の公式 (10.18) は，交換関係を具体的に計算するのに偉力を発揮する．公式 (10.18) より

$$\delta_{f(A)} = \frac{df(A)}{dA}\delta_A \tag{10.27}$$

という超演算子の関係式が導ける．これを任意の演算子 B に作用させて，交換関係 $[f(A), B]$ に対する表式

$$[f(A), B] = \delta_{f(A)}B = \frac{df(A)}{dA}[A, B] = \int_0^1 f^{(1)}(A - t\delta_A)[A, B]dt \tag{10.28}$$

が得られる．さらに，具体的に計算するには，$f^{(1)}(A - t\delta_A)$ を t でテーラー展

開すればよい．すなわち，次の公式が得られる．

公式 10.6　任意の演算子関数に対して，次式が成り立つ：

$$[f(A), B] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n!} f^{(n)}(A) \delta_A^n B. \tag{10.29}$$

例えば，$f(A) = A^m$ とすると，

$$[A^m, B] = (A^m - (A - \delta_A)^m) B \tag{10.30}$$

である．

さらに，公式 10.6 は次の公式に一般化できる．

公式 10.7　任意の 2 つの演算子関数 $f(A)$ と $g(B)$ に対して，次式が成り立つ：

$$[f(A), g(B)] = \frac{df(A)}{dA}\frac{dg(B)}{dB}[A, B]$$
$$= \int_0^1 dt \int_0^1 ds f^{(1)}(A - t\delta_A) g^{(1)}(B - s\delta_B)[A, B]. \tag{10.31}$$

証明　式 (10.27) より，

$$[f(A), g(B)] = \delta_{f(A)} g(B) = \frac{df(A)}{dA}\delta_A g(B) = -\frac{df(A)}{dA}\delta_{g(B)} A$$
$$= -\frac{df(A)}{dA}\frac{dg(B)}{dB}\delta_B A = \frac{df(A)}{dA}\frac{dg(B)}{dB}\delta_A B = \frac{df(A)}{dA}\frac{dg(B)}{dB}[A, B] \tag{10.32}$$

が成り立つ．

また，上の一般的な公式の特別の場合として次の公式が導ける．

公式 10.8　任意の 2 つの演算子関数 $f(A)$ と $g(B)$ に対して，交換子 $[A, B]$ が A とも B とも可換なとき，次式が成り立つ：

$$[f(A), g(B)] = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(A) g^{(n)}(B) [B, A]^n. \tag{10.33}$$

証明　公式 10.7 より，上記の条件 $\delta_A[A, B] = 0$, $\delta_B[A, B] = 0$ を用いて，

$$[f(A), g(B)] = \int_0^1 f^{(1)}(A - t\delta_A) g^{(1)}(B)[A, B] dt$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_0^1 t^n dt\, f^{(n+1)}(A) \big((-\delta_A)^n g^{(1)}(B)\big)[A, B]. \tag{10.34}$$

ここで，公式 10.6 を用いると，上記の条件 $\delta_B[A, B] = 0$ より，

$$(-\delta_A) g^{(1)}(B) = [g^{(1)}(B), A] = \int_0^1 g^{(2)}(B - t\delta_B)[B, A] dt = g^{(2)}(B)[B, A] \tag{10.35}$$

となる．これを n 回くり返して，

$$(-\delta_A)^n g^{(1)}(B) = g^{(n+1)}(B)[B,A]^n \tag{10.36}$$

が得られる．これを式 (10.34) に代入すると，公式 10.8 が導かれる．

この公式 10.8 の具体的な応用例として，例えば，$f(A) = \mathrm{e}^{xA}$, $g(B) = \mathrm{e}^{yB}$ とすると，次の公式が得られる．

公式 10.9　$\delta_A[A,B] = 0$ および $\delta_B[A,B] = 0$ のとき，次式が成り立つ：

$$[\mathrm{e}^{xA}, \mathrm{e}^{yB}] = \mathrm{e}^{xA}\mathrm{e}^{yB}(1 - \mathrm{e}^{xy[B,A]}). \tag{10.37}$$

物理への応用としては，運動量 p と座標 q に関する交換関係 $[\mathrm{e}^{xq}, \mathrm{e}^{yp}]$ が，交換子 $[q,p] = \mathrm{i}\hbar$ を用いて，次のように簡単に決まる：

$$[\mathrm{e}^{xq}, \mathrm{e}^{yp}] = (1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hbar xy})\mathrm{e}^{xq}\mathrm{e}^{yp}. \tag{10.38}$$

この関係式は

$$\mathrm{e}^{xq}\mathrm{e}^{yp} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hbar xy}\mathrm{e}^{yp}\mathrm{e}^{xq} \tag{10.39}$$

と等価であり，これは直接導くことも容易である．すなわち，式 (10.39) の両辺に右から e^{-xq} をかけた式が，$\delta_q^n p = 0$ $(n = 2, 3, \cdots)$ を用いて次のように示せる：

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{xq}\mathrm{e}^{yp}\mathrm{e}^{-xq} &= \exp(y\mathrm{e}^{xq}p\mathrm{e}^{-xq}) = \exp(y\mathrm{e}^{x\delta_q}p) \\ &= \exp(y(p + x\delta_q p)) = \exp(yp + \mathrm{i}\hbar xy) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hbar xy}\mathrm{e}^{yp}.\end{aligned} \tag{10.40}$$

10.7 非平衡統計物理学への応用例――フォン・ノイマン方程式の変換

非平衡統計物理学において，体系の時間発展を記述する基礎方程式は，次の密度行列 $\rho(t)$ に関するフォン・ノイマン方程式である[2)]：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = [\mathscr{H}(t), \rho(t)]. \tag{10.41}$$

ここで，$\mathscr{H}(t)$ は系のハミルトニアンである．この方程式に従う密度行列 $\rho(t)$ を用いて，系の様々の物理量の時間変化を求めることができる．例えば，エントロピー演算子 $\eta(t) = k_{\mathrm{B}}\log\rho(t)$ も式 (10.41) と同形の方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\eta(t)}{\partial t} = [\mathscr{H}(t), \eta(t)] \tag{10.42}$$

をみたすことが知られている[2)]．一般に，$\rho(t)$ の任意の関数 $f(\rho(t))$ が式 (10.41) と同じ方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(\rho(t)) = [\mathscr{H}(t), f(\rho(t))] \tag{10.43}$$

をみたす（いわば不変形式になっている）ことが，量子微分の公式 (10.18) と (10.21) を用いて次のように簡潔に示せる：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(\rho(t)) = \mathrm{i}\hbar\frac{df(\rho(t))}{d\rho(t)}\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{df(\rho(t))}{d\rho(t)}\delta_{\mathscr{H}(t)}\rho(t)$$

$$= -\frac{df(\rho(t))}{d\rho(t)}\delta_{\rho(t)}\mathscr{H}(t) = -\delta_{f(\rho(t))}\mathscr{H}(t) = [\mathscr{H}(t), f(\rho(t))]. \tag{10.44}$$

ここで，式 (10.27)，すなわち，

$$\frac{df(\rho(t))}{d\rho(t)}\delta_{\rho(t)} = \delta_{f(\rho(t))} \tag{10.45}$$

が有効に使われている．

ちなみに，線形応答の理論[7]で使われる久保の恒等式

$$[A, \mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}] = \mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}\int_0^\beta \mathrm{e}^{\lambda\mathscr{H}}[\mathscr{H}, A]\mathrm{e}^{-\lambda\mathscr{H}}d\lambda$$
$$= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}\int_0^\beta \mathrm{e}^{\lambda\mathscr{H}}\dot{A}\mathrm{e}^{-\lambda\mathscr{H}}d\lambda \equiv \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}\int_0^\beta \dot{A}(-\mathrm{i}\hbar\lambda)d\lambda \tag{10.46}$$

も量子微分の式 (10.27)，すなわち，

$$\delta_{\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}}A = \frac{d\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}}{d\mathscr{H}}\delta_{\mathscr{H}}A \tag{10.47}$$

に他ならない．

10.8 おわりに

今回は，演算子関数の量子解析，すなわち量子古典対応に主眼を置いた量子微分の基本的な公式とその簡単な応用を解説した．特に，交換関係 $[f(A), g(B)]$ の計算公式について丁寧に説明し，そのいくつかの応用例にふれた．また，非平衡統計物理学の基礎方程式であるフォン・ノイマン方程式は，密度行列の任意の関数に対しても同様に成り立つ，すなわち不変形式になっていることが量子解析を用いると容易に示されることがわかった．これは，熱場ダイナミクス[8,9]で $\rho(t)^{1/2}$ の時間変化などを扱う際などには特に重要である．次回は高階の量子微分を導入し，演算子の関数 $f(A+xB)$ の量子テーラー展開とその応用について解説する．

参考文献

1) 鈴木増雄，本連載「数理科学」2014 年 6 月号（第 1 回）より 2015 年 6 月号（第 9 回）まで．
2) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，2000 年）．
3) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **183**, 339 (1997).
4) M. Suzuki, *J. Math. Phys.* **38**, 1183 (1997).
5) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **100**, 475 (1998).
6) 鈴木増雄，『変分原理と物理学』（丸善出版，2015 年）．
7) R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957).
8) Y. Takahashi and H. Umezawa, *Collective Phenom.* **2**, 55 (1975).
9) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **54**, 4483 (1985).

（すずき・ますお，東京大学名誉教授）

経路積分と量子解析

いかにして量子現象を数理的に扱うか

第11回

量子解析(2)

高階の量子微分と量子テーラー展開

鈴木 増雄

11.1 はじめに

今回はいろいろな角度から高階の量子微分を導入し，それを用いて演算子関数 $f(A+xB)$ の量子テーラー展開の一般公式を定式化する．すなわち，セザンヌ，マチス，ピカソなどの絵のように

「多視点で（いろいろと視点座標系を変えながら）」

量子微分を定式化する．

11.2 量子ライプニッツ規則による高階量子微分の定式化

前回[1]は1階の量子微分をいくつかの方法で導入した．その中でも，古典的なライプニッツの規則 (10.7) の量子版 (10.6) を基にした定式化は，わかり易く一般性があり，高階の量子微分を導入するのに大変適している．そもそも，古典的なライプニッツの規則 (10.7) は，微分形式で書くと，その可換性より

$$d(fg) = gdf + fdg \tag{11.1}$$

と書くこともできる．量子解析では，演算子 A と微分 dA とが非可換であるから，$g(A)$ と $df(A)$ との順序も本質的に重要となり，

$$d(f(A)g(A)) = (df(A))g(A) + f(A)dg(A) \tag{11.2}$$

としなければならない．これを「量子ライプニッツ規則」と呼ぶことにする．まず，この量子ライプニッツ規則を基にして高階量子微分の表式を求めることにする．第10.4節で説明した1階量子微分の導出法をもう一度簡単に復習してお

く．恒等式 $Af(A) = f(A)A$ の両辺の全微分をとると，

$$[A, df(A)] = [f(A), dA] \tag{11.3}$$

となる．すなわち，$\delta_A df(A) = \delta_{f(A)} dA$ と書き直せるので，$df(A)$ は

$$df(A) = \frac{\delta_{f(A)}}{\delta_A} dA \tag{11.4}$$

と表される．さらに，式 (11.3) の全微分をとると，$d^2 A = 0$ より，再び量子ライプニッツ規則を用いて，

$$[dA, df(A)] + [A, d^2 f(A)] = [df(A), dA], \tag{11.5}$$

すなわち，

$$\delta_A d^2 f(A) = 2[df(A), dA] \tag{11.6}$$

が得られる．こうして，$d^2 f(A)$ が $df(A)$ を用いて表される．これをくり返すと，一般の正の整数 n に対して

$$\delta_A d^n f(A) = n[d^{n-1} f(A), dA] \tag{11.7}$$

という重要な漸化式が求まる[2)]．この漸化式のままでは，抽象的で扱いにくいので，もう少し具体的な表現形式に関する漸化式に変換しよう．古典的な微分と同様に，n 階微分 $d^n f(A)$ は n 次の微小演算子 $(dA)^n$ を n 階の量子微分 $d^n f(A)/dA^n$ で変換したものと解釈する：

$$d^n f(A) = \frac{d^n f(A)}{dA^n} \cdot (dA)^n. \tag{11.8}$$

ここで，$d^n f(A)/dA^n$ は，通常の演算子の組 $(dA, dA, \cdots, dA)$ を演算子の関数に変換する「超演算子」である．このままでは，この超演算子は抽象的過ぎて実用的でなく，式 (11.8) の意味もあいまいである．そこで，次のような n 個の「内部微分」$\delta_1, \delta_2, \cdots, \delta_n$ を導入する：

$$\delta_j (dA)^n \equiv (dA)^{j-1} (\delta_A dA)(dA)^{n-j}. \tag{11.9}$$

これらの超演算子 $\{\delta_j\}$ と $A (\equiv L_A)$ を用いて，n 階の量子微分を次のように表すことにする：

$$\frac{d^n f(A)}{dA^n} = n! g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n). \tag{11.10}$$

この表記法を用いると，式 (11.8) は単に

$$d^n f(A) = n! g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n)(dA)^n \tag{11.11}$$

と書けるので，漸化式 (11.7) は，超演算子関数 $g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n)$ の漸化式に次のように書き換えられる：

$$g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n) \delta_A (dA)^n = -\delta_{dA}(g_{n-1}(A, \delta_1, \cdots, \delta_{n-1})(dA)^{n-1})$$

$$= g_{n-1}(A,\delta_1,\cdots,\delta_{n-1})(dA)^n - (dA)g_{n-1}(A,\delta_1,\cdots,\delta_{n-1})(dA)^{n-1} \tag{11.12}$$

ここで，A と $g_n(A,\delta_1,\cdots,\delta_n)$ は互いに可換であることを用いた．さらに，式 (10.14) すなわち，公式

$$\delta_{f(A)} = f(A) - f(A-\delta_A), \tag{11.13}$$

または，

$$(dA)f(A) = f(A-\delta_A)dA \tag{11.14}$$

を用いると，式 (11.12) より，次の漸化式が得られる：

$$\begin{aligned}&(\delta_1+\cdots+\delta_n)g_n(A,\delta_1,\cdots,\delta_n)\\ &= g_{n-1}(A,\delta_1,\cdots,\delta_{n-1}) - g_{n-1}(A-\delta_1,\delta_2,\cdots,\delta_n).\end{aligned} \tag{11.15}$$

ただし，次の公式

$$\begin{aligned}\delta_A(dA)^n &= (\delta_A dA)(dA)^{n-1} + (dA)(\delta_A dA)(dA)^{n-2} + \cdots + (dA)^{n-1}\delta_A dA\\ &= (\delta_1+\delta_2+\cdots+\delta_n)(dA)^n\end{aligned} \tag{11.16}$$

を用いた．

次に，初期条件

$$g_1(A,\delta_1) = \frac{df(A)}{dA} = \frac{f(A)-f(A-\delta_1)}{\delta_1} \tag{11.17}$$

から出発し，漸化式 (11.15) を用いて，超演算子関数 $g_n(A,\delta_1,\cdots,\delta_n)$ のあらわな表式を求めよう．ここで，$A,\{\delta_j\}$ はどれも互いに可換であるから，$\{g_m(A,\delta_1,\cdots,\delta_m)\}$ は通常の関数のように扱って計算できる．これは，量子解析の定式化の大きな利点の一つである．

まず，2 階の量子微分の表式から始めよう．式 (11.15) より，

$$\begin{aligned}g_2(A,\delta_1,\delta_2) &= \frac{1}{\delta_1+\delta_2}(g_1(A,\delta_1) - g_1(A-\delta_1,\delta_2))\\ &= \frac{1}{\delta_1+\delta_2}\left(\frac{f(A)-f(A-\delta_1)}{\delta_1} - \frac{f(A-\delta_1)-f(A-\delta_1-\delta_2)}{\delta_2}\right)\\ &= \frac{f(A)-f(A-\delta_1)}{\delta_1\delta_2} - \frac{f(A)-f(A-\delta_1-\delta_2)}{(\delta_1+\delta_2)\delta_2}\end{aligned} \tag{11.18}$$

が得られる．1 階の量子微分は積分表示すると，大変簡潔で実用的になり，しかも古典的な n 階微分 $f^{(n)}(x)$ との関係も直接的になる[2)]：

$$g_1(A,\delta_1) = \frac{f(A)-f(A-\delta_1)}{\delta_1} = \int_0^1 f^{(1)}(A-t\delta_1)dt. \tag{11.19}$$

そこで，2 階の量子微分も古典的な 2 階微分 $f^{(2)}(x)$ の 2 重積分で表示してみると，次のようになることが容易にわかる[2)]：

$$g_2(A, \delta_1, \delta_2) = \int_0^1 dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 f^{(2)}(A - t_1\delta_1 - t_2\delta_2). \tag{11.20}$$

このようにして，一般の n 階量子微分は，古典的な n 階微分 $f^{(n)}(x)$ の n 重積分を用いて次のように表されることが容易に証明できる[2)]：

公式 11.1 (n 階量子微分の公式)　超演算子関数 $g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n) \equiv \frac{1}{n!}\frac{d^n f(A)}{dA^n}$ に対して，次式が成り立つ：

$$\frac{1}{n!}\frac{d^n f(A)}{dA^n}$$
$$= \int_0^1 dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n f^{(n)}(A - t_1\delta_1 - t_2\delta_2 - \cdots - t_n\delta_n) \tag{11.21}$$

これらの表式を用いると，次の節で説明するように互いに非可換な演算子 A と B の関数 $f(A+xB)$ の x に関するテーラー展開（いわゆる**量子テーラー展開**）ができる[2)].

11.3 量子テーラー展開の公式[2)]

数学や物理では，互いに非可換な演算子 A と B の和 $(A+xB)$ の関数 $f(A+xB)$ を x でテーラー展開する必要に迫られることがよくある．今までは，そのつど，その関数の特徴を利用したうまい工夫により，テーラー展開の公式が発見されてきた．例えば，もっともよく知られているのは，次のレゾルベント展開の公式である：

$$\begin{aligned}\frac{1}{A+xB} &= \frac{1}{A} - x\frac{1}{A}B\frac{1}{A+xB} \\ &= \frac{1}{A} - x\frac{1}{A}B\frac{1}{A} + x^2\frac{1}{A}\left(B\frac{1}{A}\right)^2 + \cdots + (-x)^n\frac{1}{A}\left(B\frac{1}{A}\right)^n + \cdots .\end{aligned} \tag{11.22}$$

また，物理でよく用いられるテーラー展開は指数演算子 e^{A+xB} の展開公式（ファインマンの公式）である[3)]：

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{t(A+xB)} &= \mathrm{e}^{tA}\left(1 + x\int_0^t \mathrm{e}^{-t_1 A}B\mathrm{e}^{t_1(A+xB)}dt_1\right) \\ &= \mathrm{e}^{tA}\left(1 + x\int_0^t B(t_1)dt_1 + x^2\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2 B(t_1)B(t_2) + \cdots\right. \\ &\quad \left. + x^n\int_0^t dt_1\int_0^{t_2} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n B(t_1)B(t_2)\cdots B(t_n) + \cdots\right).\end{aligned} \tag{11.23}$$

ただし，

$$B(t) = \mathrm{e}^{-tA}B\mathrm{e}^{tA} \tag{11.24}$$

である．式 (11.23) で $t=1$ とおくと，e^{A+xB} の展開公式となるのは自明である．パラメータ t を入れておくと，式 (11.23) の第 1 行目の等式が証明し易く

なる（すなわち，両辺を t で微分した式が等しいことを示せばよい）．

さて，A と B が互いに可換な場合には，A を x，B を y とおいて古典的な微分 $D \equiv d/dx$ を用いると，$f(x+y)$ のテーラー展開は

$$f(x+y) = \mathrm{e}^{yD} f(x) = f(x) + f^{(1)}(x)y + \cdots + \frac{f^{(n)}(x)}{n!} y^n + \cdots \quad (11.25)$$

となることはよく知られている通りである．これに対応して，非可換演算子の関数 $f(A+xB)$ の場合には次の公式が成り立つ．

公式 11.2（量子テーラー展開の一般公式） 非可換演算子の関数 $f(A+xB)$ に対して，次式が成り立つ：

$$f(A+xB) = f(A) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \frac{d^n f(A)}{dA^n} B^n. \quad (11.26)$$

ただし，n 階量子微分 $d^n f(A)/dA^n$ は式 (11.21) で与えられ，その中の $\{\delta_j\}$ は量子テーラー展開の公式の場合には，

$$\delta_j B^n = B^{j-1}(\delta_A B) B^{n-j} \quad (11.27)$$

と解釈する[2]．

11.4 指数演算子の量子テーラー展開

指数演算子のテーラー展開 (11.23) を一般公式 (11.26) から導いてみよう．指数関数 $f(x) = \mathrm{e}^x$ の古典的 n 階微分 $f^{(n)}(x)$ は $f^{(n)}(x) = \mathrm{e}^x$ で変わらないので，式 (11.23) では，“微分” があらわに見えず “積分” だけで高次の展開が表されており，一見奇異な感じがする．

さて，指数演算子 $\exp(A+xB)$ の量子テーラー展開の x^n の係数は，一般公式 (11.26) と式 (11.21) より，

$$\frac{1}{n!} \frac{d^n \mathrm{e}^A}{dA^n} B^n$$
$$= \int_0^1 dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \exp(A - t_1\delta_1 - t_2\delta_2 - \cdots - t_n\delta_n) B^n \quad (11.28)$$

となる．そこで，上式の右辺の積分の中の部分を，よりわかり易い形に書き直す．ここで，$A, \{\delta_j\}$ は互いに可換であるから，

$$\begin{aligned} \exp(A - t_1\delta_1 - \cdots - t_n\delta_n) B^n &= \mathrm{e}^A (\mathrm{e}^{-t_1\delta_1} B)(\mathrm{e}^{-t_2\delta_2} B) \cdots (\mathrm{e}^{-t_n\delta_n} B) \\ &= \mathrm{e}^A B(t_1) B(t_2) \cdots B(t_n) \quad (11.29) \end{aligned}$$

と書き換えられる．ただし，次の公式（両辺を t で展開し両辺が等しいことより確かめられる）を用いた：

$$\mathrm{e}^{-t\delta_A} B = \mathrm{e}^{-tA} B \mathrm{e}^{tA} \equiv B(t). \quad (11.30)$$

こうして，量子テーラー展開の一般公式 (11.26) と式 (11.21) より，よく知られた指数演算子の量子テーラー展開公式 (11.23)（正確には $t=1$ とした式）が導ける．

実は，指数演算子の量子テーラー展開公式は，量子テーラー展開の一般論にとっても特別に重要な意味を持っている[2)]．それは逆に，表式 (11.28) から，一般の演算子関数 $f(A)$ に対する量子テーラー展開の式 (11.21) と式 (11.26) を導くことができるからである[2)]．すなわち，一般の関数を指数関数で展開し，各項に，式 (11.28) を適用し，再び全体をまとめると一般公式が得られる[2)]．また，一般に高階量子微分が多重積分で表せるのではないかというヒントはファインマンの公式 (11.23) の美しさへの筆者の強い思いにあった．

11.5 差分の極限としての高階量子微分

前回の式 (10.3)，すなわち，差分の極限

$$df(A)=\lim_{h\to 0}\frac{f(A+hdA)-f(A)}{h} \tag{11.31}$$

として定義される量子微分をくり返し用いることにより，高階の量子微分を導入することもできる[2)]．まず，2 階の量子微分 $d^2f(A)$ は，

$$\begin{aligned}d^2f(A)&=\lim_{h_2\to 0}\frac{df(A+h_2dA)-df(A)}{h_2}\\&=\lim_{h_2\to 0}\lim_{h_1\to 0}\frac{1}{h_2}\biggl(\frac{f(A+h_2dA+h_1dA)-f(A+h_2dA)}{h_1}\\&\qquad\qquad-\frac{f(A+h_1dA)-f(A)}{h_1}\biggr)\end{aligned} \tag{11.32}$$

となる．ここで，$h_1=h_2=h$ として極限をとっても同じ結果になるので，2 階の量子微分は

$$\begin{aligned}d^2f(A)&=\lim_{h\to 0}\frac{1}{h^2}\bigl(f(A+2hdA)-2f(A+hdA)+f(A)\bigr)\\&=\lim_{h\to 0}\frac{1}{h^2}\bigl(f(A+hdA)-2f(A)+f(A-hdA)\bigr)\end{aligned} \tag{11.33}$$

と定義することもできる．一般の正の整数 n に対しては，

$$d^nf(A)=\lim_{h\to 0}\sum_{j=0}^{n}\frac{(-1)^{n-j}}{h^n}\binom{n}{j}f(A+jhdA) \tag{11.34}$$

と定義できる[2)]．この定義を用いて，n 階量子微分の公式 **11.1** を導くことも容易にできる[2)]．

11.6 複素積分表示を用いた高階量子微分の定式化

演算子 A が有界，すなわち，固有値がすべて有限であれば，複素 z 平面上の十分大きな積分路 C を用いて，演算子関数 $f(A)$ は次のダンホード (Dunford)

積分で表される：

$$f(A)=\frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\int_{\mathrm{C}}\frac{f(z)}{z-A}dz. \tag{11.35}$$

ただし，積分路 C は原点のまわりに反時計回りにとるものとし，その円の中に A の固有値がすべて含まれるものとする．演算子 B も有界であれば，レゾルベント展開の公式 (11.22) を用いて，$f(A+xB)$ は，

$$\begin{aligned}
f(A+xB)&=\frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\int_{\mathrm{C}}\frac{f(z)}{z-(A+xB)}dz\\
&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{2\pi \mathrm{i}}\int_{\mathrm{C}}\frac{f(z)}{z-A}\left(B\frac{1}{z-A}\right)^n dz\\
&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{2\pi \mathrm{i}}\int_{\mathrm{C}}dz\frac{f(z)}{(z-A)(z-A+\delta_1)\cdots(z-A+\delta_1+\delta_2+\cdots+\delta_n)}B^n\\
&=\sum_{n=0}^{\infty}x^n\int_0^1 dt_1\int_0^{t_1}dt_2\cdots\int_0^{t_{n-1}}dt_n f^{(n)}(A-t_1\delta_1-\cdots-t_n\delta_n)B^n
\end{aligned} \tag{11.36}$$

と表される[2)]（最後の式の導出には，数学的帰納法を用いるとよい）．こうして，再び，量子テーラー展開の一般公式 (11.26)（および式 (11.21)）が導ける．上の式の変形には，次の公式を用いた[2)]：

$$\begin{aligned}
&B\frac{1}{z-A}=\frac{1}{z-A+\delta_A}B=\frac{1}{z-A+\delta_1}B,\\
&\left(B\frac{1}{z-A}\right)^2=\left(\frac{1}{z-A+\delta_A}B\right)\left(\frac{1}{z-A+\delta_A}B\right)\\
&=\frac{1}{z-A+\delta_1}B\frac{1}{z-A+\delta_2}B\\
&=\frac{1}{(z-A+\delta_1)(z-A+\delta_1+\delta_2)}B^2,\\
&\quad\vdots\\
&\left(B\frac{1}{z-A}\right)^n\\
&=\frac{1}{(z-A+\delta_1)(z-A+\delta_1+\delta_2)\cdots(z-A+\delta_1+\cdots+\delta_n)}B^n.
\end{aligned} \tag{11.37}$$

このように，量子テーラー展開の公式は，いろいろな方法で導くことのできる一般的な公式であり，大変有用である．非可換な演算子の関数の高階量子微分や量子テーラー展開が，互いに可換な「超演算子」で表されることは，量子解析の大きな特徴であり利点である[2)]．

11.7 量子（情報）エントロピーの理論に役立つ対数関数の量子テーラー展開

指数演算子や分数演算子の他に，対数演算子 $\log(A+xB)$ の量子テーラー展

開も量子統計力学[2]や量子情報理論などでは必要になる．量子テーラー展開の一般公式より，容易に次の公式が導ける：

$$\begin{aligned}\log(A+xB) &= \log A + \int_0^1 \frac{x}{A-t\delta_A}dt\cdot B+\cdots \\ &= \log A - x\left(\delta_A^{-1}\log\left(1-A^{-1}\delta_A\right)\right)B+\cdots \\ &= \log A + x\int_0^\infty \frac{1}{t+A}B\frac{1}{t+A}dt+\cdots. \end{aligned} \tag{11.38}$$

上式の最後の積分表示は，次のようにして導かれる[4,5]：

$$\begin{aligned}\log(A+xB) &= \int_0^\infty \left(\frac{1}{t+1}-\frac{1}{t+A+xB}\right)dt \\ &= \int_0^\infty \left(\frac{1}{t+1}-\frac{1}{t+A}\right)dt + x\int_0^\infty \frac{1}{t+A}B\frac{1}{t+A}dt + \mathrm{O}(x^2) \\ &= \log A + x\int_0^\infty \frac{1}{t+A}B\frac{1}{t+A}dt+\mathrm{O}(x^2). \end{aligned} \tag{11.39}$$

上の積分の中の $(t+1)^{-1}$ の項は，積分の $t\to\infty$ での収束のためのものである．

11.8 おわりに

今回は，高階量子微分の多重積分による公式とそれを用いた量子テーラー展開の一般公式の様々な視点からの定式化を解説した．次回からは，指数演算子の高次分解公式，すなわち計算物理の基礎公式に関する問題などを量子微分および量子微分方程式を用いて議論する．

参考文献

1) 鈴木増雄，本連載第 10 回，「数理科学」2015 年 8 月号．
2) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **183**, 339 (1997).
3) 鈴木増雄，『統計力学』(岩波書店，2000 年)．
4) D. Pez, *J. Math. Phys.* **35**, 780 (1994).
5) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **100**, 475 (1998).

（すずき・ますお，東京大学名誉教授）